



Thèse
présentée pour obtenir le titre de
Docteur de l'Institut National Polytechnique de Toulouse
Spécialité : Mécanique de Fluides

Développement d'une méthode de simulation d'écoulements à bulles et à gouttes.

par

Thomas BONOMETTI

Thèse soutenue le 29 novembre 2005 devant le jury composé de :

A. BERLEMONT	Membre
A. CARTELLIER	Rapporteur
J.F. DOMGIN	Membre invité
P. GARDIN	Membre
C. GOURDON	Président
P. LE QUÉRÉ	Rapporteur
J. MAGNAUDET	Directeur des travaux de recherche

N° d'ordre :

Table des Matières

INTRODUCTION.....	7
CHAPITRE 1 ETAT DE L'ART.....	9
I. LES DIFFERENTES METHODES NUMERIQUES DE SUIVI D'INTERFACE SUR MAILLAGE FIXE	13
1) <i>Les méthodes qui suivent explicitement l'interface</i>	13
2) <i>Les méthodes qui capturent l'interface</i>	17
II. PRESENTATION DE LA VERSION DIPHASIQUE DU CODE JADIM.....	20
1) <i>Le modèle « à un fluide »</i>	20
2) <i>Résolution des bilans de masse et de quantité de mouvement</i>	24
3) <i>Résolution de l'équation de transport du taux de présence</i>	29
CHAPITRE 2 AMELIORATION DE LA TECHNIQUE DE CAPTURE DE L'INTERFACE	35
I. POSITION DU PROBLEME ET SOLUTIONS ADOPTEES	37
1) <i>Position du problème</i>	37
2) <i>Conservation de la masse des fluides</i>	39
3) <i>Conservation de la raideur des fronts</i>	43
II. TESTS DE L'ALGORITHME DE TRANSPORT DU TAUX DE PRESENCE	53
1) <i>Translation</i>	53
2) <i>Rotation</i>	54
3) <i>Etirement</i>	55
4) <i>Rotation et déformation</i>	59
CHAPITRE 3 VALIDATION DE L'OUTIL NUMERIQUE	65
I. PHENOMENES CAPILLO-GRAVITAIRES.....	67
1) <i>Rupture d'un barrage</i>	67
2) <i>Onde de gravité-capillarité</i>	68
3) <i>Oscillations d'une bulle</i>	70
4) <i>Etalement d'une lentille sur un bain fluide</i>	75
II. PHENOMENES VISQUEUX	78
1) <i>Ecoulement de Poiseuille diphasique</i>	78
2) <i>Sédimentation d'un réseau de cylindres</i>	80
3) <i>Sédimentation d'un réseau de sphères</i>	83
III. DYNAMIQUE DE BULLES	85
1) <i>Montées d'une bulle isolée dans un liquide initialement au repos</i>	85
2) <i>Coalescence de deux bulles</i>	94
3) <i>Montée de deux bulles sphériques côte à côte</i>	96
CHAPITRE 4 QUELQUES ECOULEMENTS A BULLES ET A GOUTTES : DES PETITS AUX GRANDS NOMBRES DE REYNOLDS	103
I. MICROFLUIDIQUE DIPHASIQUE	105
1) <i>La problématique</i>	105
2) <i>Simulation d'un train de gouttes dans un micro-canal</i>	107
3) <i>Comparaison avec les expériences</i>	114
II. FORME D'UNE BULLE ISOLEE MONTANT SOUS L'EFFET DE LA PESANTEUR	120
1) <i>Simulations axisymétriques dans la gamme ($Bo=1-1000$; $Re=1-1000$)</i>	120
2) <i>Bulles toriques ou calottes sphériques ?</i>	125
3) <i>Bulle traversant une interface liquide-liquide</i>	129
III. DYNAMIQUE D'UN NUAGE DE BULLES	135
1) <i>Suspension à nombre de Reynolds modéré</i>	135
2) <i>Suspension à grand nombre de Reynolds</i>	143
CONCLUSION ET PERSPECTIVES	147
BIBLIOGRAPHIE	151

Résumé

L'un des problèmes majeurs rencontré dans la simulation directe des écoulements diphasiques concerne le suivi précis des interfaces au cours du temps et la gestion des changements de topologie (déformation, rupture, coalescence). Les méthodes de simulation où les interfaces évoluent librement sur un maillage fixe permettent de décrire efficacement ces changements de topologie. Le travail présenté ici concerne le développement d'un outil numérique efficace permettant de décrire des écoulements diphasiques dont les rapports de densité et de viscosité peuvent être grands et prenant en compte les effets capillaires. Les applications visées concernent aussi bien les problèmes posés par le génie des procédés que par la propulsion ou les échanges océan-atmosphère. Le transport des interfaces est assuré par une méthode de capture de front sans reconstruction. On montre que la version de base de cette méthode épaissit les zones interfaciales dans les régions où l'écoulement est fortement étiré et on propose une technique de modification de la vitesse dans ces zones qui permet de s'affranchir du problème. Le nouvel algorithme permet aux interfaces de se déplacer librement tout en conservant une épaisseur numérique constante d'environ trois cellules de calcul. Il est testé sur de nombreux écoulements non uniformes et la méthode globale est validée sur différents problèmes de complexité croissante par comparaison avec d'autres résultats théoriques, expérimentaux ou numériques de référence. L'outil numérique ainsi amélioré permet l'étude détaillée de plusieurs aspects de la dynamique des écoulements à bulles et à gouttes intervenant sur une gamme d'échelles de longueur allant de quelques dizaines de microns (mélange dans une goutte en micro-canal) à quelques centimètres (interactions au sein d'un nuage de bulles) dans des configurations axisymétriques ou pleinement tridimensionnelles. Les résultats concernant la microfluidique sont comparés à des expériences très récentes. Une série importante de simulations concernant la montée d'une bulle à travers un liquide, voire deux liquides superposés, est ensuite discutée et validée par rapport aux résultats de la littérature. Enfin des simulations tridimensionnelles de la dynamique d'une suspension comprenant jusqu'à 27 bulles ont été réalisées et analysées. Ces simulations permettent notamment de mettre en évidence l'influence du nombre de Reynolds des bulles sur l'intensité des fluctuations de vitesse qu'elles induisent dans le liquide.

Mots clés : dynamique des fluides, écoulements diphasiques, équations de Navier-Stokes, simulation numérique, suivi d'interface, bulles, gouttes, coalescence, microfluidique.

Abstract

One of the major technical issues in the area of direct simulation of incompressible two-phase flows is to deal with an accurate tracking of interfaces as time proceeds and with changes in interface shape and topology. Numerical methods where interfaces freely evolve on a fixed grid have proved to be efficient for treating such complex phenomena. This work deals with the development of an interface-capturing method aimed at computing three-dimensional incompressible two-phase flows that may involve high density and viscosity ratios and capillary effects. The applications we have in mind concerns chemical engineering as well as environmental problems. We use a front-capturing method to advance the interface but do not perform any explicit reconstruction. We show that the base version of this method results in a smearing of the fronts in regions where the flow undergoes a stray stretching. We propose an improved technique in which the local velocity field within the fronts is modified and the above problem is fixed. This algorithm allows the interfaces to deform properly while maintaining the numerical thickness of the transition region within three computational cells. The overall transport algorithm is tested in several nonuniform flows and the whole numerical method is validated by comparing computational results with analytical solutions and available experimental or numerical data. A detailed study of several aspects of the dynamics of two- and three-phase flows, such as drops in microchannels or hydrodynamic interactions in a bubble swarm, is then performed in both axisymmetric and three-dimensional configurations. The results concerning microfluidics are compared with very recent experiments. A large series of computations concerned with the rise of a single bubble through a liquid or through two superimposed liquids is then discussed and validated against existing data. Finally, three-dimensional computation of the dynamics of a bubbly suspension involving up to 27 bubbles are carried out and analyzed. Among others things these simulations allow us to enlighten the influence of the bubbles Reynolds number on the velocity fluctuations induced in the liquid.

Key Words: computational fluid dynamics, two-phase flow, Navier-Stokes equations, front capturing, interface tracking, volume of fluid, bubbly flow, drops, coalescence, microfluidics.

Remerciements

Je remercie Messieurs Alain Berlemont, Jean-François Domgin et Pascal Gardin d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse, Messieurs Alain Cartellier et Patrick Le Quéré pour le temps qu'ils ont consacré à la lecture de mon document, et Monsieur Christophe Gourdon pour avoir présidé ce jury.

Je remercie Pascal Gardin, mon interlocuteur industriel pour l'intérêt et l'enthousiasme qu'il a manifesté envers ce travail pendant trois ans. Merci aussi pour son accueil lors de mes visites au centre de recherches d'Arcelor à Maizières-les-Metz. Merci à Jean-François Domgin pour m'avoir permis d'apprécier, au regard des différentes maquettes expérimentales, la complexité des phénomènes intervenant dans les procédés de la métallurgie.

Je remercie tout les personnels de l'IMFT pour leur participation à la réussite de ce travail, et notamment Gilles Martin et tout le Service Informatique, Christine Pinel et Marie-Hélène Manzato, les secrétaires du groupe Interface, et Muriel Sabater du Service Reprographie.

Un très grand merci à tous les membres du groupe Interface. La disponibilité et la sympathie des personnes qui le composent ont permis de créer une ambiance et un dynamisme disons-le exceptionnels. Je salue à ce titre les efforts de François Charru et de Frédéric Risso pour avoir favorisé ces échanges par l'organisation de réunions « à bâtons rompus » avec les doctorants et de « Séminaires Scientifiques Interface ». Une pensée pour tous les doctorants ou post-doctorants du groupe qui ont participé à l'aventure : Axel, Bernardo, Emeline, Eric, Géraldine, Guillaume, Hamdi, Jean-Baptiste, Jean-Rémi, Jiri, Juan, Marie, Micheline, Pedro, Richard, Vincent, Yann et Yannick. Une pensée particulière pour mes deux voisins de bureau, Axel et Jean-Baptiste, qui ont permis par leur bonne humeur et leurs qualités, de créer une véritable synergie au sein de la « VOF Team ».

Je remercie Flavie Sarrazin, Laurent Prat et Christophe Gourdon du Laboratoire de Génie Chimique de Toulouse pour m'avoir fait découvrir un monde où les gouttes d'eau n'étaient pas plus grandes que le chas d'une aiguille et de m'avoir donner envie d'y regarder de plus près... Un grand merci à Dominique Legendre, légende vivante de l'équipe de football du groupe Interface, pour ses conseils et son aide précieuse à la compréhension des rouages du code JADIM. Merci aussi aux membres du Service Cosinus et particulièrement à Annaïg Pedrono pour avoir pris part à la métamorphose du code.

Je tiens à manifester mes sincères remerciements à Jacques Magnaudet. Son encadrement de thèse fut tout simplement exemplaire. Sans diminuer ses qualités scientifiques, ce sont surtout sa disponibilité, sa pédagogie et sa bonne humeur qui ont rendu, rendent et rendront les collaborations qu'il mène si fructueuses et pérennes. Même avec un nez cassé, il garde le sourire. Bravo à toi !

Enfin j'adresse ma profonde reconnaissance à mes parents Gérard et Nicole, mes frère et sœur Vincent et Lisa, et ma compagne Nadia, pour leur soutien, leur patience et leur perspicacité quand il s'agissait d'expliquer à autrui ce que je faisais...

Introduction

Les écoulements diphasiques sont présents dans de multiples applications. Celles-ci concernent aussi bien les problèmes posés par le génie des procédés (agitation, mélange, séparation, flottation) que par la propulsion (injection, atomisation, cavitation) ou encore par les échanges océan-atmosphère (déferlement, production d'embruns). La complexité de ces écoulements est double : d'une part les interfaces peuvent se déformer, se casser ou se reconnecter, et leur position est une inconnue supplémentaire du problème. D'autre part ces interfaces peuvent évoluer à des échelles très variées allant de quelques microns dans le cas de la microfluidique diphasique jusqu'à des échelles de quelques mètres dans le cas de vagues déferlantes (voir figure I.1). Par ailleurs ces interfaces sont le siège d'une physique propre où les effets capillaires, la contamination par les tensio-actifs et le changement de phase jouent souvent un grand rôle. Dans le cadre de cette thèse ce sont les applications métallurgiques qui sont essentiellement visées, notamment celles liées au brassage de l'acier liquide et au transport d'impuretés sous forme fluide ou solide à l'intérieur de celui-ci. Ce travail a donc été effectué dans le cadre d'une collaboration entre Arcelor Research, centre de recherches en procédés du groupe Arcelor (ex-Usinor) et l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT) par le biais d'une Bourse de Docteur Ingénieur du CNRS cofinancée par Arcelor Research. La complexité de ces écoulements (haute température, écoulements gaz-liquide fortement turbulents avec présence d'inclusion solides et de réactions chimiques, acier liquide dense et opaque, présence d'effets ferromagnétiques) rend les techniques de mesures expérimentales difficiles, coûteuses et le plus souvent peu précises. C'est pourquoi une approche d'expérimentation numérique, pour laquelle il est possible d'accéder aux grandeurs instantanées en tout point de l'écoulement, est particulièrement souhaitable dans ce domaine.

Depuis une quinzaine d'années différentes approches ont été élaborées afin de pouvoir traiter de tels problèmes. La simulation directe des écoulements diphasiques représente en effet un champ particulièrement actif de la mécanique des fluides numérique. Aux difficultés classiques posées par la résolution des équations de Navier-Stokes se rajoute le problème crucial du suivi des interfaces et de leur changement de topologie. Le groupe Interface de l'IMFT participe depuis plusieurs années à cet effort de simulation. Il a développé pour ceci un code mettant en œuvre une technique de suivi des interfaces sans reconstruction, basée sur des schémas numériques de capture de front issus de la dynamique des gaz (*Benkenida & Magnaudet 2000*). Ce code est aujourd'hui tridimensionnel et capable de traiter l'interaction de trois phases fluides avec présence d'effets capillaires entre chacune d'elles. Sa principale limitation, comme celle des autres codes basés sur la même famille de méthodes, réside dans l'érosion progressive de la raideur des interfaces au fur et à mesure de l'avancement de la simulation. Si ce point n'est pas limitant pour simuler des phénomènes rapides (impact de gouttes, percement d'interfaces...), il est en revanche très pénalisant lorsque les phénomènes présentent des temps caractéristiques longs ou requièrent d'atteindre un état quasi-stationnaire.

Le premier objectif, essentiellement numérique, de cette thèse est donc de repousser cette limitation en améliorant les techniques de suivi des interfaces. On s'efforce de garder à la technique utilisée

un caractère aussi “automatique” que possible, c’est-à-dire en particulier d’éviter les procédures de reconstruction lagrangienne de type Volume Of Fluid (*Scardovelli & Zaleski 1999*), ou Front Tracking (*Unverdi & Tryggvason 1992*). En effet si celles-ci produisent d’excellents résultats, elles nécessitent de la part de l’utilisateur un suivi attentif de l’évolution des interfaces au cours du calcul et un certain doigté dans la mise en œuvre. Cet état de fait est peu compatible avec un transfert des codes en direction des centres de recherche industriels. Notre orientation sur ce point est donc de pousser à leurs limites les techniques de capture de front de type FCT (*Boris & Book 1973*) qui permettent davantage une simulation “à l’aveugle”. Le deuxième volet de cette thèse consiste à étudier au moyen du code de simulation ainsi amélioré plusieurs aspects de la dynamique des écoulements à bulles et à gouttes intervenant sur une gamme d’échelle de longueur allant de quelques dizaines de microns à quelques centimètres. Ce travail permet à son terme de disposer d’un outil de simulation performant en termes de suivi des interfaces et de modèles physiques mais aussi d’utilisation suffisamment facile pour pouvoir être transféré avec profit dans un contexte de centre de recherche industriel.

Le mémoire s’articule autour de quatre chapitres. Le premier décrit d’une part l’état de l’art concernant les méthodes numériques de simulation des écoulements diphasiques dont la topologie est complexe (déformation, rupture, coalescence) et d’autre part la méthode retenue dans ce travail, les hypothèses faites, les équations résolues et les modélisations effectuées. Dans le second chapitre nous présentons une méthode originale de transport de la fraction volumique de phase qui permet de conserver les interfaces raides au cours de la simulation et nous montrons ses avantages et ses limitations sur de nombreux cas d’écoulements non uniformes. L’ensemble de la méthode est alors validée dans le troisième chapitre sur des problèmes de complexité croissante, par comparaison avec d’autres résultats de référence, théoriques, expérimentaux ou numériques. Le quatrième et dernier chapitre s’intéresse à l’étude de quelques écoulements à gouttes et à bulles balayant une large gamme de nombres de Reynolds et qui interviennent dans des problèmes aussi variés que le mélange dans les gouttes en micro-canal ou l’interaction de bulles millimétriques et centimétriques dans les nuages denses.

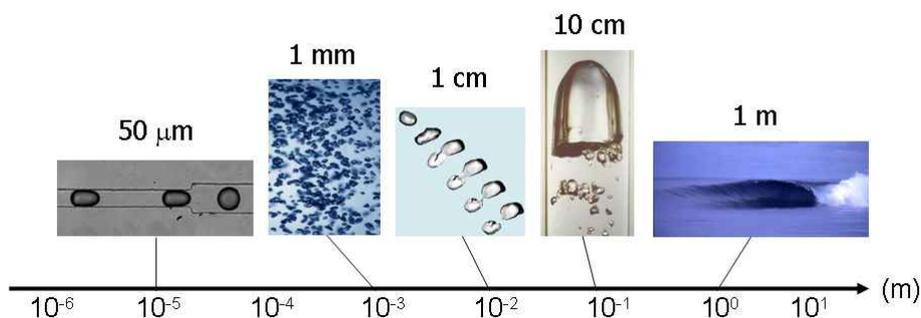


Figure I.1: Quelques écoulements à topologie complexe.

De gauche à droite : train de gouttes dans un micro-canal ; écoulement à bulles dans un tube ; rupture d’une bulle ; bulle de Taylor dans un tube vertical ; vague déferlante.

Chapitre 1

Etat de l'art

De la même façon qu'une particule fluide peut être regardée d'un point de vue lagrangien (on la suit au cours du temps) ou d'un point de vue eulérien (on regarde les particules fluides qui passent en un point donné de l'écoulement), il est possible de suivre une interface sous ces deux points de vue. Dans les méthodes lagrangiennes, l'interface constitue l'une des frontières d'un maillage mobile adaptatif. Ce maillage est remis à jour à chaque pas de temps. La figure 1.1 montre un exemple de maillage adaptatif utilisé par *Blanco 1995* pour étudier les modes d'oscillation d'une bulle soumise à un champ acoustique.

Avec les méthodes lagrangiennes, il est possible d'accéder à tous les détails de l'hydrodynamique de l'écoulement étudié et les interfaces peuvent être suivies avec précision, tant que le nombre de ces interfaces reste figé. Cependant, la possibilité d'employer ces méthodes est fortement remise en cause quand il s'agit de traiter des problèmes physiques où interviennent la rupture et la reconnection d'interfaces (cas de la majorité des écoulements à interfaces déformables). Dans de tels cas, non seulement il faut remettre à jour le maillage utilisé mais il faut aussi tenir compte des interfaces qui apparaissent à la suite d'une rupture et de celles qui disparaissent à la suite d'une reconnection. La tâche est rendue encore plus difficile par la large gamme dans laquelle peut varier la taille des interfaces. Dans ces situations on se trouve dans l'obligation de s'orienter vers des méthodes utilisant une grille fixe sur laquelle se déplacent les interfaces : ces méthodes sont appelées « eulériennes » (voir figure 1.2).

Avec les méthodes eulériennes, on ne peut utiliser directement les équations de bilan locales et instantanées car une cellule de calcul peut contenir simultanément plusieurs fluides. C'est donc réellement un milieu multiphasique qu'il faut localement représenter et non plus la juxtaposition de plusieurs écoulements monophasiques. Il est alors indispensable d'utiliser une autre formulation des équations de conservation qui ne peut être que moins fine que celle issue directement de la mécanique des milieux continus, mais qui permet de simuler les écoulements multiphasiques à topologie variable : on parle alors de modèle à un fluide (voir Chapitre 1 - Partie II). On ne considère plus dans ce cadre les différentes phases fluides de façon séparée, mais un seul mélange fluide dont les propriétés physiques (densité, viscosité) peuvent varier très fortement en fonction de la concentration en chacun des fluides « purs ». Comment dans ce cas matérialiser l'interface ? C'est sur ce point que les méthodes eulériennes diffèrent les unes des autres. C'est pourquoi dans la première partie de ce chapitre nous décrivons le paysage actuel de ces méthodes tandis que dans la seconde partie nous exposons en détail celle retenue dans ce travail.

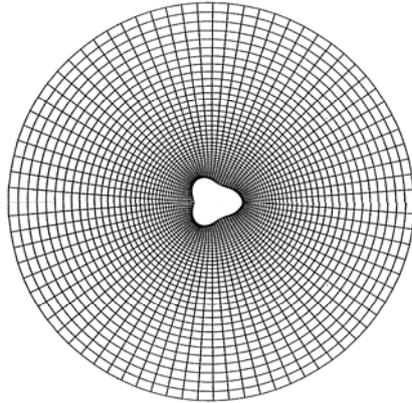


Figure 1.1: Maillage curviligne orthogonal axisymétrique (l'axe de symétrie est horizontal) (Blanco 1995).

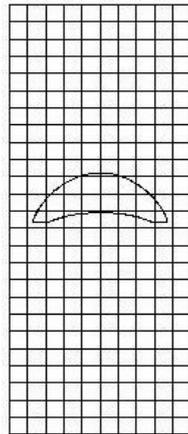


Figure 1.2: Interface évoluant librement sur un maillage fixe.

I. Les différentes méthodes numériques de suivi d'interface sur maillage fixe

1) *Les méthodes qui suivent explicitement l'interface*

Les méthodes de Suivi de Front (Front Tracking)

On peut penser tout d'abord introduire des marqueurs pour repérer l'interface. Ils peuvent être répartis dans tout le domaine ou simplement sur l'interface. Ces marqueurs sont liés entre eux par des segments fictifs qui forment la trame d'un second maillage. Celui-ci est mobile par rapport au premier maillage fixe et décrit l'interface dans sa totalité (voir figure 1.3).

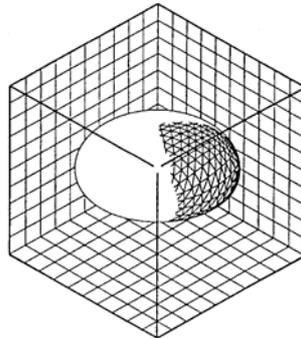


Figure 1.3: Les maillages fixe et mobile des méthodes de type Front Tracking.

Ce type de méthodes, communément appelées méthodes de suivi de front ou « Front Tracking », permettent de connaître avec précision la position et l'orientation de l'interface et ainsi d'évaluer avec précision les contributions visqueuses et capillaires. Cette approche a été introduite par Tryggvason au début des années 90 (*Unverdi & Tryggvason 1992*). Elle est par exemple utilisée par *Bunner & Tryggvason 2002* pour simuler les mouvements tridimensionnels engendrés par une suspension de bulles (environ 200) dont les caractéristiques sont typiquement un nombre de Bond $Bo = \rho g d^2 / \sigma$ compris entre 1 et 5 et un nombre de Reynolds $Re = \rho V d / \mu$ compris entre 20 et 30 (voir figure 1.4), ρ et μ étant respectivement la densité et la viscosité du fluide porteur, g la gravité, d le diamètre des bulles et σ la tension de surface.

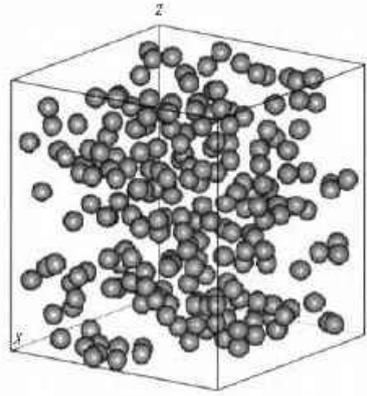


Figure 1.4: Simulation d'une suspension de bulles montant dans un liquide initialement au repos (Bunner & Tryggvason 2002).

Ces méthodes se limitent cependant souvent à des écoulements où les interfaces sont peu déformées car la gestion de la distribution des marqueurs peut s'avérer fort complexe notamment pour traiter les ruptures et les reconnections. Ce problème est à rapprocher de ceux rencontrés dans les méthodes lagrangiennes qui ont à gérer des maillages mobiles. De récents travaux ont cependant permis de s'affranchir du problème de gestion de marqueurs et de simuler par exemple la coalescence de deux bulles (Torres & Brackbill 2000, Shin & Juric 2002) et le phénomène d'ébullition nucléée (Juric & Tryggvason 1998, Shin & Juric 2002). L'idée de Shin & Juric 2002 consiste à utiliser deux représentations de l'interface, l'une s'appuyant sur un maillage mobile (à caractère discontinu), l'autre s'appuyant sur une fonction indicatrice de phase (à caractère continu). Lors du calcul, l'interface évolue avec le maillage mobile, et périodiquement (toutes les centaines de pas de temps environ), la fonction indicatrice de phase est calculée et l'interface est « reconstruite » (voir le paragraphe suivant) à partir du champ continu ; le maillage mobile est alors mis à jour. Bien que le temps de calcul et la mémoire nécessaire aient fortement diminué grâce à la parallélisation des codes, la mise en œuvre de ces techniques reste complexe. De plus les « petites » structures de l'écoulement (dont l'échelle est inférieure à celle de la cellule de calcul) ne sont prises en compte d'aucune manière.

Les méthodes de suivi en volume avec reconstruction d'interface (VOF Interface Tracking)

Une autre façon de représenter les interfaces est d'utiliser une fonction indicatrice de phase, continue dans l'espace et qui contient toute l'information sur la présence d'une phase en un point donné de l'écoulement. Comment définir une telle fonction ? On peut par exemple imaginer une fonction qui prend localement une valeur constante aux points où se trouve une phase donnée, cette valeur étant différente pour chaque phase. Pour un écoulement eau-air, cette fonction peut être définie comme valant 1 dans les cellules de calcul où il y a de l'air et 0 dans celles où il y a de l'eau. L'interface est alors définie comme le lieu des points où la fonction passe de 0 à 1. La figure 1.5 décrit la façon dont une bulle circulaire est représentée avec cette fonction.

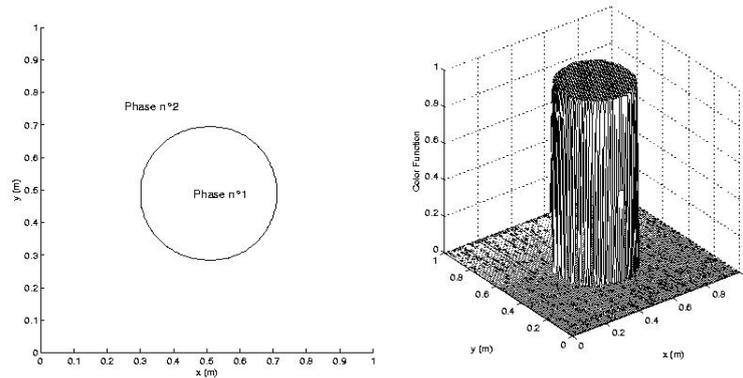


Figure 1.5: Représentation de l'interface avec la fonction indicatrice de phase.

De plus, cette fonction a une interprétation physique : moyennée sur un volume infinitésimal, c'est localement la fraction volumique de phase, appelée aussi taux de présence de phase (volume of fluid function). L'idée directrice est alors de transporter la fraction volumique locale de l'une des phases en résolvant son équation d'évolution (purement hyperbolique) puis de reconstruire la distribution spatiale des différentes propriétés physiques à l'aide de la seule connaissance des valeurs de cette fraction volumique et de ses gradients. Le caractère continu de la fonction permet alors de simuler simplement les changements de topologie (rupture ou coalescence, transition d'un écoulement stratifié à un écoulement à phase dispersée). Cependant les très fortes variations de la fonction à la traversée de l'interface posent de sérieux problèmes numériques. En effet, les schémas supportent généralement mal les fonctions « raides ». Si le schéma est trop dispersif (c'est-à-dire s'il a tendance à déformer le contenu fréquentiel d'un signal), il peut apparaître des oscillations non physiques à l'endroit des forts gradients ou « chocs », déstabilisant le calcul et rendant les résultats inexploitable. A l'inverse si le schéma est trop dissipatif (c'est-à-dire s'il a tendance à déformer l'amplitude du signal), il n'y a pas d'oscillation mais les fronts initialement raides s'étalent exagérément et l'interface n'est plus décrite de façon précise. La figure 1.6 décrit le résultat du calcul de propagation d'un créneau par une équation d'advection à vitesse constante pour un schéma dissipatif (graphe de gauche) et un schéma dispersif (graphe de droite).

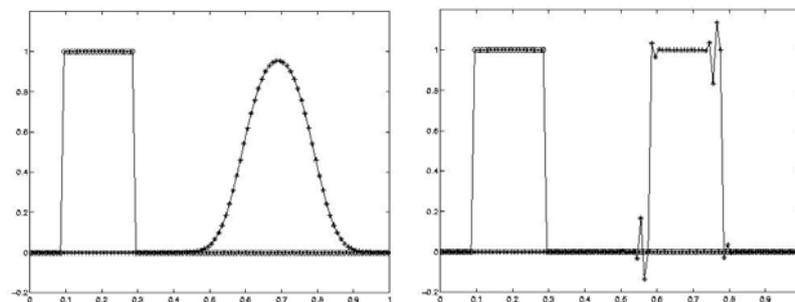


Figure 1.6: Propagation d'un créneau par une équation d'advection : exemple de schémas numériques dissipatif (à gauche) et dispersif (à droite), la solution exacte est le créneau.

Tout le problème consiste à élaborer des schémas numériques qui puissent transporter des fronts raides sans créer d'oscillation non physique, ni étaler les fronts. De nombreux schémas ont été

développés dans ce but, principalement pour décrire des écoulements en présence de chocs (voir par exemple *Stiriba 2002*) et étudier la dynamique des gaz (*Boris & Book 1973*) ; il s'agit dans les deux cas de résoudre une équation différentielle hyperbolique qui régit le transport d'une grandeur particulière (pression, fraction volumique de phase, fonction de distance signée, ...). Nous nous contenterons de citer ici trois grandes classes de schémas car ce sont celles qui sont les plus couramment utilisées, à savoir les schémas FCT (Flux Corrected Transport) (*Boris & Book 1973, Zalesak 1979, DeVore 1998*), les schémas TVD (Total Variational Diminishing) (*Harten 1983, Sweby 1984, Yee 1987, Vincent & Caltagirone 1999*) et les schémas ENO-WENO (Weighted Essentially Non Oscillatory) (*Harten 1987, Shu & Osher 1998, Jiang & Shu 1996*). Malgré tout, ces schémas ont du mal à conserver les fronts raides dès que les écoulements sont fortement non uniformes. C'est pourquoi de nombreuses méthodes de suivi en volume « reconstruisent » l'interface à chaque pas de temps, pour s'affranchir des oscillations et de la diffusion d'origine numérique des fronts. Cette méthode originalement décrite par *Hirt & Nichols 1981* a subi de nombreuses évolutions (*Youngs 1982, Lafaurie et al. 1994, Rider & Kothe 1998*). L'une des reconstructions les plus utilisées est le calcul d'interface affine par morceaux (Piecewise linear interface reconstruction PLIC) (*DeBar 1974, Li 1995*). Dans un premier temps, les segments d'interfaces sont reconstruits dans chaque cellule de la zone interfaciale, à partir des valeurs de la fonction taux de présence et de ses gradients. La difficulté de cette étape de reconstruction réside dans le raccordement des segments d'interfaces appartenant aux différentes cellules voisines. Dans un second temps, les segments sont transportés en résolvant l'équation d'évolution du taux de présence (*Hirt & Nichols 1981*), ou de façon lagrangienne (*Gueyffier et al. 1999*). Un exemple de simulation dû à *Gueyffier et al. 1999* est donné sur la figure 1.7. Cependant, l'extension de cette approche à des écoulements tridimensionnels n'est pas directe, car l'on ne doit plus alors raccorder des segments mais des plans entre les cellules voisines. Il est de plus nécessaire d'effectuer une grande quantité de tests logiques pour déterminer la position et l'orientation exacte de ces plans.

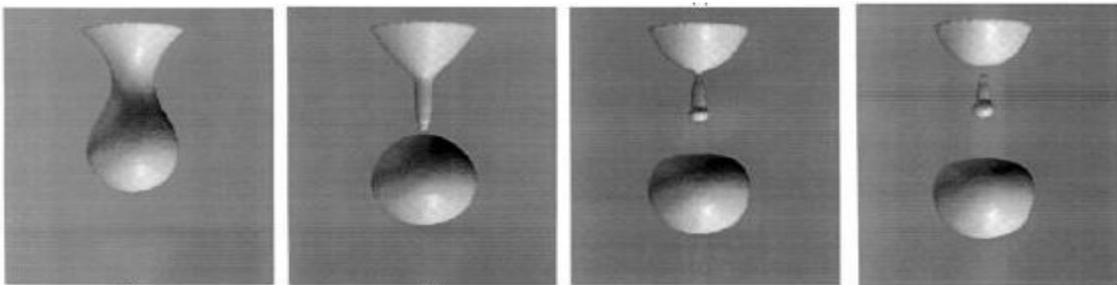


Figure 1.7: Simulation de la rupture d'une goutte pendante (*Gueyffier et al. 1999*).

2) Les méthodes qui capturent l'interface

Les méthodes utilisant une fonction de distance signée (Level Set methods)

Au regard des problèmes engendrés par les fonctions « raides », certaines méthodes utilisent un autre type de fonction pour décrire la position de l'interface. Cette fonction est lisse et régulière de sorte que les schémas numériques ont moins de difficulté à la transporter. Elle est définie comme nulle aux points situés sur l'interface, positive dans une phase et négative dans l'autre, sa pente est égale à l'unité. Cette fonction correspond alors à une fonction dite de distance signée (Level Set). A titre d'exemple, si la fonction est définie comme positive dans la phase eau, une valeur de 0,345 en un point nous informe que ce point se trouve dans la phase eau à une distance de 0,345 unités de l'interface. La figure 1.8 décrit la façon dont une bulle circulaire est représentée à l'aide cette fonction.

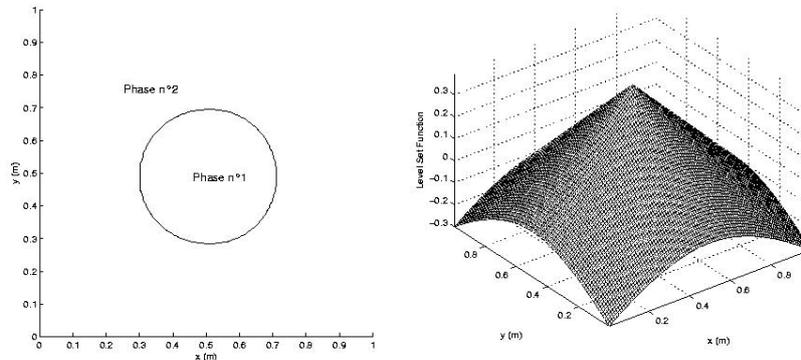


Figure 1.8: Représentation de l'interface avec la fonction level set.

Les méthodes Level Set ont été introduites par *Osher & Sethian 1988*, et utilisées dans de nombreux domaines autres que les écoulements multiphasiques, comme l'imagerie numérique et la reconnaissance de forme (*Gomes & Faugeras 2000*), ou encore l'étude de la croissance des cristaux métalliques (*Adalsteinsson & Sethian 1995*). *Sethian 2001* et *Osher & Fedkiw 2001* recensent les différentes applications de la méthode Level Set. Elle permet en outre de simuler des écoulements diphasiques (*Sussman & Smereka 1997*, cf figure 1.9, *Oka & Ishii 1999*), et de prendre en compte le changement de phase (*Son & Dhir 1998*, *Lakehal et al. 2002*). Le problème triphasique de la ligne triple a été abordé avec ce type d'approche par *Zhao et al. 1996* et plus récemment par *Spelt 2005*.

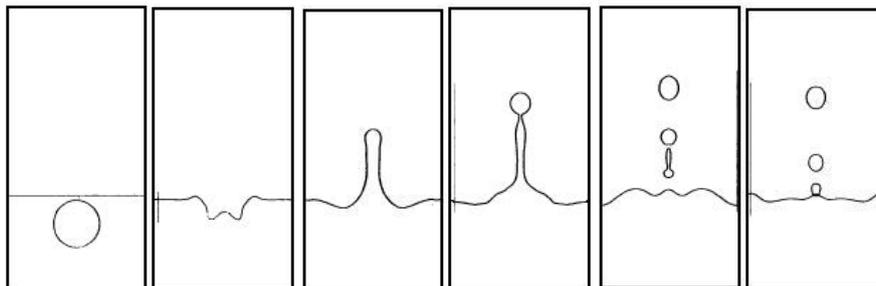


Figure 1.9: Jet d'eau formé par une bulle d'air de diamètre 1cm (*Sussman & Smereka 1997*).

Comme toute méthode qui transporte une fonction continue pour décrire l'interface, la méthode Level Set se heurte à certains problèmes lorsque les écoulements ne sont plus uniformes. Même si l'interface a par définition une épaisseur nulle, la pente de la fonction augmente ou diminue suivant les cas. Il faut alors la modifier périodiquement au cours du calcul pour ramener son gradient à l'unité. Cette opération constitue une étape supplémentaire dite de « réinitialisation » qui a tendance à modifier la position de l'interface (zéro de la fonction Level Set), et nuire ainsi à la conservation de la masse globale (*Sussman 1997*). *Adalsteinsson & Sethian 1999* ont développé une méthode d'extension de la vitesse autour de l'interface qui permet de réduire considérablement le nombre de réinitialisations et d'améliorer la conservation de la masse. Le principe de cette méthode repose sur une modification de la valeur de la vitesse au voisinage de l'interface qui tend à rendre l'écoulement localement uniforme, de sorte que la pente de la fonction Level Set reste localement constante.

Les méthodes de suivi en volume sans reconstruction d'interface (Interface Capturing)

Une autre stratégie qui emprunte à la fois aux méthodes VOF et Level Set, consiste à transporter la fraction volumique (qui est raide) de l'une des phases sans passer par l'étape de reconstruction de l'interface. Celle-ci est alors implicitement repérée par les iso-valeurs de C . C'est le type d'approche qui est mis en œuvre dans le code JADIM développé au sein de l'IMFT. Tout comme les méthodes Level Set, les méthodes de suivi en volume sans reconstruction d'interface présentent l'avantage de pouvoir traiter des écoulements en deux comme en trois dimensions sans difficulté supplémentaire. De plus, l'extension à plus de deux phases est relativement simple (*Cranga 2002*). La figure 1.10 présente la simulation d'un écoulement triphasique tridimensionnel d'une bulle d'air en ascension dans de l'eau (nombre de Bond $Bo = \rho g d^2 / \sigma = 15$, nombre de Morton $Mo = g \mu^4 / \rho \sigma^3 = 10^{-11}$), qui perce une couche d'huile de silicone ($Bo = 50$, $Mo = 10^{-2}$), et éclate à la surface de la couche d'huile en entraînant de l'eau dans son sillage. *Olsson & Kreiss 2005* ont une approche similaire. Elles utilisent une fonction Level Set qui varie de 0 à 1 dans la région interfaciale, ce qui la rend très comparable au taux de présence. Leur méthode fait appel à une étape supplémentaire de recompression de la nouvelle fonction Level Set et permet d'éviter le recours à l'étape de réinitialisation. Cependant, les problèmes physiques traités restent bidimensionnels.

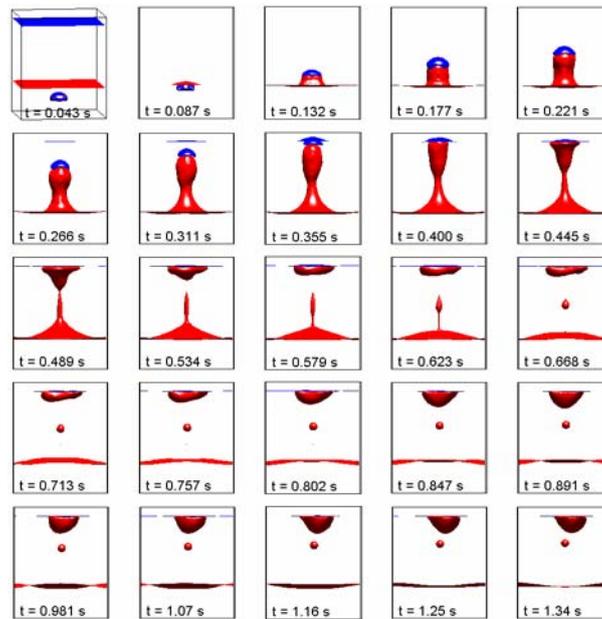


Figure 1.10: Simulation d'une bulle d'air dans de l'eau percant une couche d'huile de silicone (Cranga 2002).

Le principal inconvénient de ces méthodes réside évidemment dans l'étalement des fronts raides (diffusion numérique importante). Il a été montré (Benkenida 1999) que cet effet se manifeste en particulier lorsque les fronts évoluent dans des écoulements à fort étirement. Les gradients du taux de présence de phase sont alors sous estimés, et certains effets sont mal décrits. Des développements ont été effectués au cours de cette thèse afin de s'affranchir de ce problème. Ils font l'objet du Chapitre 2.

Les autres méthodes...

Les méthodes évoquées précédemment ne sont que quelques exemples de la grande variété des méthodes numériques disponibles pour traiter les écoulements multiphasiques à topologie complexe. Nous citerons donc sans rentrer dans les détails les techniques adaptatives de raffinement de maillage à l'interface (Hubbard 2002, Sussman et al. 1999, Jameson 2003), l'utilisation des solveurs de Riemann pour les situations compressibles (Billett et al. 1997, Stiriba 2002), les modèles de champ de phase (Jacqmin 1999, Jamet et al. 2001) et les méthodes de type Lattice Boltzmann (Sankaranarayan et al. 2002, Inamuro et al. 2004). Une tendance récente consiste à coupler deux approches différentes pour en additionner les points forts : Marqueurs – Level Set (Enright et al. 2002), VOF Interface Tracking – Level Set (Sussman & Puckett 2000), Front Tracking – VOF Interface Tracking (Popinet & Zaleski 1999, Tagaki et al. 2003, De Sousa et al. 2004).

La méthode mise en oeuvre dans le cadre de ce travail correspond à la méthode de suivi en volume sans reconstruction d'interface. Dans la partie suivante, nous décrivons en détail quelles sont les équations qui sont résolues et comment elles sont traitées numériquement au sein du code JADIM.

II. Présentation de la version diphasique du code JADIM

1) *Le modèle « à un fluide »*

On représente l'écoulement de deux fluides incompressibles non miscibles par un modèle à un seul fluide. Celui-ci demeure incompressible mais sa densité et ses propriétés physiques varient de manière abrupte à la traversée des interfaces. L'évolution de cet écoulement est décrite par les équations suivantes :

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (1.1 \text{ a})$$

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \mathbf{g} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{T} - \frac{\sigma}{\rho} (\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \delta_I \quad (1.1 \text{ b})$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla C = 0 \quad (1.2)$$

où C est le taux de présence de phase, \mathbf{V} est la vitesse et P est la pression. \mathbf{g} est la gravité ou une autre force extérieure, \mathbf{T} est le tenseur des contraintes visqueuses, ρ , μ et σ sont respectivement la masse volumique, la viscosité dynamique et la tension de surface. \mathbf{n} est le vecteur unitaire normal à l'interface et δ_I est la distribution de Dirac qui vaut 1 aux points sur l'interface et 0 ailleurs.

Les équations (1.1) correspondent aux lois de conservation de la masse et de la quantité de mouvement du « mélange » diphasique, l'équation (1.2) correspond au transport de la fraction volumique d'un des fluides. Ce système comporte cinq équations pour cinq inconnues (\mathbf{V} , P , C), à condition d'exprimer ρ , μ , \mathbf{n} et δ_I en fonction de C et de ses gradients ainsi que des propriétés de chaque fluide. Ces équations sont obtenues par sommation des lois de conservation de la masse et de la quantité de mouvement dans chaque fluide en tenant compte des bilans locaux aux interfaces. Elles sont ensuite filtrées sur un volume caractéristique dont la taille est celle de la cellule de calcul. Pour plus de détails sur la dérivation du modèle à un fluide, le lecteur est invité à se reporter à *Benkenida 1999*. La fraction volumique C vaut 1 dans une des phases, 0 dans l'autre, et des valeurs intermédiaires dans les cellules traversées par l'interface. Cette dernière est donc repérée implicitement par les iso-valeurs de C comprises entre 0 et 1. Enfin le modèle a été étendu au cas de trois phases par *Cranga 2002*. Il faut alors résoudre une équation supplémentaire de transport de la fraction volumique de la phase supplémentaire.

Les hypothèses

Les hypothèses faites lors de la dérivation du modèle à un fluide consistent à supposer que les fluides sont newtoniens, immiscibles et incompressibles et qu'il n'y a pas de glissement local entre phases : en un point donné, ou plutôt à l'intérieur d'une même cellule de calcul, les deux phases vont à la même vitesse. Dans le cas présent on considère les écoulements isothermes et on suppose que la tension de surface est constante. Ces deux hypothèses peuvent cependant être facilement relaxées.

Modélisation de la densité du mélange

La densité étant une grandeur extensive, elle s'exprime simplement en fonction de C et des densités de chaque fluide par $\rho = \sum_i C_i \rho_i$, où C_i et ρ_i sont respectivement la fraction volumique et la densité de la phase i . Dans le cas diphasique, la relation devient : $\rho = C \rho_1 + (1-C) \rho_2$, car les fractions volumiques vérifient $\sum_i C_i = 1$ en tout point du domaine ($i=1,2$ pour un écoulement diphasique, $i=1,3$ pour un écoulement triphasique).

Modélisation du tenseur des contraintes visqueuses

Le tenseur des contraintes visqueuses est généralement modélisé en calquant directement la formulation monophasique, c'est-à-dire en multipliant le tenseur des déformations du mélange avec une viscosité bâtie de manière analogue à la densité. Ce modèle que nous désignerons par « modèle à une viscosité » s'écrit :

$$\mathbf{T} = \mu (\nabla \mathbf{V} + {}^t \nabla \mathbf{V}) \quad (1.3)$$

avec

$$\mu = C \mu_1 + (1-C) \mu_2 \quad (1.4)$$

Cependant la viscosité n'est pas une grandeur extensive, et contrairement à la masse volumique la pondération linéaire n'est pas rigoureuse. *Magnaudet & Benkenida 2000* montrent que dans le cas d'un écoulement diphasique il est nécessaire de faire intervenir deux expressions pour la viscosité du mélange, l'une permettant un calcul correct des contraintes normales à l'interface (notée μ_L et dénommée dans la suite « viscosité linéaire »), l'autre assurant la continuité des cisaillements aux interfaces (notée μ_H et dénommée dans la suite « viscosité harmonique »). Le tenseur des contraintes ainsi modélisé dépend alors des viscosités des deux fluides μ_1 et μ_2 , du tenseur des taux de déformations de l'écoulement $\mathbf{S} = (\nabla \mathbf{V} + {}^t \nabla \mathbf{V})/2$ et de l'orientation de l'interface, par l'intermédiaire des composantes du vecteur unitaire normal \mathbf{n} . Ce modèle de contraintes visqueuses est désigné par la suite « modèle à deux viscosité ». Il est défini par :

$$\mathbf{T}_{ij} = \tau_{ij} + \tilde{\tau}_{ij} = 2\mu_L \mathbf{S}_{ij} + 2(\mu_H - \mu_L) [\mathbf{S}_{ij} n_k n_j + \mathbf{S}_{jk} n_k n_i - 2\mathbf{S}_{km} n_k n_m n_i n_j] \quad (1.5)$$

avec

$$\mu_L = C\mu_1 + (1-C)\mu_2 \quad (1.6 \text{ a})$$

$$\mu_H = \frac{\mu_1 \mu_2}{C\mu_2 + (1-C)\mu_1} \quad (1.6 \text{ b})$$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{V} + {}^t \nabla \mathbf{V}) \quad (1.7)$$

où l'on a choisi C comme taux de présence de la phase 1. Le tenseur \mathbf{T} est la somme de deux contributions : $\boldsymbol{\tau}$ correspond au modèle à une viscosité. Nous verrons au Chapitre 3 quelle est l'influence des deux modèles sur des cas physiques. Les différentes composantes du tenseur symétrique $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$ s'écrivent :

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = 2 (\mu_H - \mu_L)^*$$

$$\left[\begin{array}{ccc} \left(\begin{array}{l} (2n_1^2 - 2n_1^4) S_{11} + \\ (2n_1 n_2 - 4n_1^3 n_2) S_{12} + \\ (2n_1 n_3 - 4n_1^3 n_3) S_{13} + \\ (-2n_1^2 n_2^2) S_{22} + \\ (-4n_1^2 n_2 n_3) S_{23} + \\ (-2n_1^2 n_3^2) S_{33} \end{array} \right) & \left(\begin{array}{l} (n_1 n_2 - 2n_1^3 n_2) S_{11} + \\ (n_1^2 + n_2^2 - 4n_1^2 n_2^2) S_{12} + \\ (n_2 n_3 - 4n_1^2 n_2 n_3) S_{13} + \\ (n_1 n_2 - 2n_1 n_2^3) S_{22} + \\ (n_1 n_3 - 4n_1 n_2^2 n_3) S_{23} + \\ (-2n_1 n_2 n_3^2) S_{33} \end{array} \right) & \left(\begin{array}{l} (n_1 n_3 - 2n_1^3 n_3) S_{11} + \\ (n_2 n_3 - 4n_1^2 n_2 n_3) S_{12} + \\ (n_1^2 + n_3^2 - 4n_1^2 n_3^2) S_{13} + \\ (-2n_1 n_2^2 n_3) S_{22} + \\ (n_1 n_2 - 4n_1 n_2 n_3^2) S_{23} + \\ (n_1 n_3 - 2n_1 n_3^3) S_{33} \end{array} \right) \\ * & \left(\begin{array}{l} (-2n_1^2 n_2^2) S_{11} + \\ (2n_1 n_2 - 4n_1 n_2^3) S_{12} + \\ (-4n_1 n_2^2 n_3) S_{13} + \\ (2n_2^2 - 2n_2^4) S_{22} + \\ (2n_2 n_3 - 4n_2^3 n_3) S_{23} + \\ (-2n_2^2 n_3^2) S_{33} \end{array} \right) & \left(\begin{array}{l} (-2n_1^2 n_2 n_3) S_{11} + \\ (n_1 n_3 - 4n_1 n_2^2 n_3) S_{12} + \\ (n_1 n_2 - 4n_1 n_2 n_3^2) S_{13} + \\ (n_2 n_3 - 2n_2^3 n_3) S_{22} + \\ (n_2^2 + n_3^2 - 4n_2^2 n_3^2) S_{23} + \\ (n_2 n_3 - 2n_2 n_3^3) S_{33} \end{array} \right) \\ * & * & \left(\begin{array}{l} (-2n_1^2 n_3^2) S_{11} + \\ (-4n_1 n_2 n_3^2) S_{12} + \\ (2n_1 n_3 - 4n_1 n_3^3) S_{13} + \\ (-2n_2^2 n_3^2) S_{22} + \\ (2n_2 n_3 - 4n_2 n_3^3) S_{23} + \\ (2n_3^2 - 2n_3^4) S_{33} \end{array} \right) \end{array} \right] \quad (1.8)$$

Modélisation des effets capillaires

Le terme capillaire $(\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \delta_I$ utilise le modèle CSF « Continuum Surface Force » introduit par *Brackbill et al. 1992* pour un mélange diphasique. Ce modèle permet de représenter la force capillaire sous forme d'une contribution volumique. En définissant la normale \mathbf{n} par $\nabla C / \|\nabla C\|$ et la distribution δ_I par $\|\nabla C\|$, on exprime directement ce terme en fonction des gradients de C par :

$$\sigma(\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \delta_I = \sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \right) \nabla C \quad (1.9)$$

Pour un écoulement triphasique, *Cranga 2002* généralise le modèle sous la forme :

$$\sigma(\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \delta_{ij} \equiv -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \delta_{ij} (C_i + C_j)^2 \sigma_{ij} \nabla \cdot \left[\frac{\nabla C_{ij}}{\|\nabla C_{ij}\|} \right] \nabla C_{ij} \quad (1.10)$$

avec

$$C_{ij} = \frac{C_i}{C_i + C_j} \quad (1.11)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } \|\nabla C_i\| \|\nabla C_j\| \neq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.12)$$

$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ désignant la tension interfaciale entre les phases i et j , C_i et C_j les taux de présence des phases i et j respectivement.

Pour plus d'informations concernant le modèle triphasique, nous renvoyons le lecteur à *Cranga 2002*.

Le couplage entre les équations

Les équations ont rigoureusement la même forme que les équations de Navier-Stokes pour un écoulement monophasique, avec la présence d'une force volumique supplémentaire due aux effets capillaires et celle de l'équation de transport du taux de présence de phase qui donne l'information sur la nature de la phase en point donné. Le couplage entre le transport du taux de présence et l'écoulement se fait d'une part par la présence de la vitesse dans l'équation de C , d'autre part par la présence du terme capillaire et des propriétés physiques du mélange dans le bilan de quantité de mouvement.

2) *Résolution des bilans de masse et de quantité de mouvement*

Petit historique du code JADIM

JADIM est un code de calcul développé depuis une quinzaine d'années au sein du groupe INTERFACE de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse. Ce code est constitué d'un noyau central permettant la résolution des équations tridimensionnelles, instationnaires et incompressibles de Navier-Stokes écrites en coordonnées curvilignes orthogonales. Ce noyau a été utilisé pour traiter par la résolution numérique directe de nombreux problèmes d'hydrodynamique locale comme par exemple la dynamique d'une bulle isolée dans des écoulements instationnaires ou cisailés (*Rivero 1991, Magnaudet et al. 1995, Legendre 1996, Legendre & Magnaudet 1998*), et plus récemment les interactions entre deux bulles (*Legendre et al. 2003*) ainsi qu'entre une bulle et une paroi. A ce noyau central se sont greffés plusieurs modules : le module « Simulation des

grandes échelles de la turbulence » (*Calmet 1995, Calmet & Magnaudet 1997, Calmet & Magnaudet 2003, Merle 2004, Merle et al. 2005*), le module « Suivi lagrangien de particules et couplage inverse » (*Climent 1996, Climent & Magnaudet 1999*), le module « Transport d'un scalaire » (*Legendre 1996, Legendre et al. 1998*), et le module « Suivi d'interfaces mobiles » (*Benkenida 1999, Cranga 2002*). Seul le module « Suivi d'interfaces mobiles » est considéré ici.

Discrétisation spatiale

Les équations (1.1) et (1.2) sont écrites en variables vitesse - pression - fraction volumique et sont discrétisées sur un maillage à variables décalées par une méthode de type Volumes Finis du second ordre (*Magnaudet et al. 1995*). L'avantage de ce type de maillage est la facilité et la précision des calculs de flux sur les facettes des volumes d'intégration ainsi que la qualité du couplage vitesse-pression. Ce type de maillage est illustré sur la figure 1.11 pour une cellule de calcul dans les cas bi- et tridimensionnel. A chaque composante de vitesse correspond un volume d'intégration différent, respectivement \mathfrak{U} , \mathfrak{V} , \mathfrak{W} pour les trois composantes de la vitesse. La pression, le taux de présence et éventuellement tous les autres scalaires sont intégrés sur le volume \mathfrak{p} .

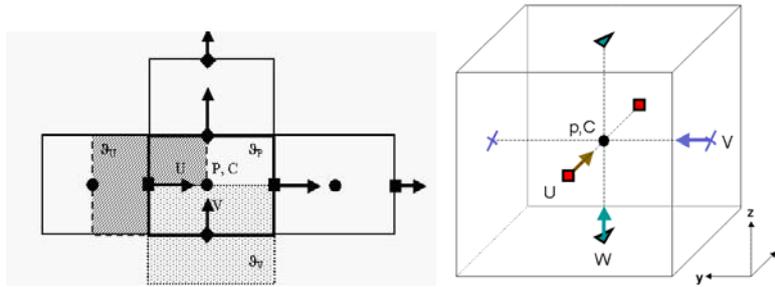


Figure 1.11: Position des nœuds de pression, de vitesse et de taux de présence de phase sur le maillage décalé, en deux et trois dimensions.

Les équations (1.1) sont intégrées sur chaque volume élémentaire \mathfrak{V} borné par une surface fermée Γ . En coordonnées curvilignes orthogonales elles s'écrivent en notation indicielle :

$$\int_{\Gamma} \mathbf{V}_i n_i d\Gamma = 0 \quad (1.13)$$

$$\begin{aligned}
\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial V_i}{\partial t} d\mathcal{V} = & - \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \xi_i} d\mathcal{V} \\
& + \int_{\mathcal{V}} g_i d\mathcal{V} \\
& + \int_{\mathcal{V}} H_j^i V_j V_i d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} H_i^j V_j V_i d\mathcal{V} - \int_{\Gamma} V_i V_j N_j d\Gamma \\
& - \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{\rho} H_j^i \tau_{ij} d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{\rho} H_i^j \tau_{ij} d\mathcal{V} + \int_{\Gamma} \frac{1}{\rho} \tau_{ij} N_j d\Gamma \\
& - \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{\rho} H_j^i \tilde{\tau}_{ij} d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{\rho} H_i^j \tilde{\tau}_{ij} d\mathcal{V} + \int_{\Gamma} \frac{1}{\rho} \tilde{\tau}_{ij} N_j d\Gamma \\
& + \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{\rho} F_{V_i} d\mathcal{V}
\end{aligned} \tag{1.14}$$

où ξ_i désigne la $i^{\text{ème}}$ coordonnée ξ curviligne et N_i la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur normal à la surface fermée Γ . Le symbole H_j^i désigne le facteur de courbure de la coordonnée i dans la direction j (voir *Rivero 1991* et *Magnaudet et al. 1995*). Le tenseur taux de déformation \mathbf{S} qui intervient dans les contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau}$ et $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$ s'écrit en coordonnées curvilignes orthogonales :

$$\mathbf{S}_{ij} = \left[\frac{\partial V_i}{\partial \xi_j} + \frac{\partial V_j}{\partial \xi_i} - H_j^i V_j - H_i^j V_i + 2 H_i^k V_k \delta_{ij} \right] \tag{1.15}$$

où δ_{ij} est le tenseur de Kronecker. Nous reconnaissons dans le second membre de l'équation (1.14) les termes de pression, de gravité, d'advection, de diffusion par viscosité ainsi que le terme dû aux effets capillaires.

Calcul du terme capillaire

L'intégrale de volume du terme capillaire $\int_{\mathcal{V}} \frac{1}{\rho} F_{V_i} d\mathcal{V}$ est réécrite de façon à appliquer le théorème

de divergence à la courbure $\nabla \cdot \mathbf{n}$. On réécrit donc ce terme sous la forme $\sigma \left[\int_{\Gamma} (\nabla C / \|\nabla C\|) \cdot \mathbf{N} d\Gamma \right] \overline{\nabla C}$

où $\overline{\nabla C}$ est la valeur moyenne de ∇C intégrée sur le volume de la cellule de calcul. Toutes les contributions sont calculées par des différences centrées en espace, mais les erreurs de discrétisation spatiale conduisent à des erreurs sur le calcul de la courbure et de la normale. Ces erreurs, injectées dans le second membre du bilan de quantité de mouvement, créent des vitesses parasites qu'on appelle généralement courants parasites. A défaut de s'en débarrasser complètement, ces courants sont atténués au maximum en remplaçant dans le calcul du terme capillaire le taux de présence réel par un taux de présence lissé \hat{C} obtenu en appliquant une moyenne pondérée entre le taux de présence considéré en un point donné et le taux de présence des points voisins : les gradients de \hat{C} sont alors plus homogènes. Dans le cas bidimensionnel la procédure de lissage élémentaire au point

dont les coordonnées du maillage sont (i,j) a pour expression $\hat{C}_{i,j} = 3/4C_{i,j} + (C_{i+1,j} + C_{i-1,j} + C_{i,j+1} + C_{i,j-1})/4$. Cette procédure est effectuée uniquement pour le calcul de la force capillaire. En pratique le nombre de lissages successifs est de l'ordre d'une dizaine.

Discrétisation temporelle

L'avancement en temps est décrit en détail dans *Calmet & Magnaudet 1997*. Les termes advectifs et les termes sources tels que la gravité sont traités par un schéma de Runge-Kutta du troisième ordre tandis que le terme visqueux est traité par un schéma semi-implicite de Crank-Nicolson. Seul le terme $\int_{\Gamma} \frac{\partial V_i}{\partial \xi_j} N_j d\Gamma$ intervenant dans le calcul de $\int_{\Gamma} \frac{1}{\rho} \tau_{ij} N_j d\Gamma$ est traité implicitement, tous les autres sont traités de façon explicite. La propriété d'incompressibilité est satisfaite au moyen d'une méthode de projection décrite un peu plus loin. Pour ce faire, à la fin de chaque pas de temps on résout une pseudo-équation de Poisson faisant intervenir une fonction potentiel auxiliaire ϕ à partir de laquelle on calcule le champ de vitesse \mathbf{V}^{n+1} à l'instant $n+1$. La pression est calculée par inversion directe pour les cas bidimensionnels (algorithme de Cholesky) et par une méthode itérative pour les cas tridimensionnels. Cette méthode itérative fait appel à la technique du Gradient Conjugué Préconditionné. La routine JCG de la librairie ITPACK dans laquelle le préconditionnement est de type Jacobi est généralement utilisée. Le pas de temps numérique est calculé en tenant compte des différentes contributions afin d'assurer la stabilité du calcul. Chaque contribution explicite impose une contrainte sur le pas de temps. Celles-ci sont résumées sur le tableau 1.1. De même dans le cas où le maillage est irrégulier, c'est le plus petit Δx qui impose le pas de temps. C'est le pas de temps le plus faible (donc le plus restrictif) qui est retenu.

Contribution physique	Contrainte sur le pas de temps
Inertie	$\Delta t_a \leq \frac{\Delta x}{U}$
Viscosité	Schéma explicite : $\Delta t_v \leq \frac{\Delta x^2}{\nu}$ Schéma semi-implicite : $\Delta t_v < \infty$
Gravité	$\Delta t_g \leq \sqrt{\frac{\Delta x}{g}}$
Capillarité	$\Delta t_\sigma \leq \sqrt{\frac{(\rho_1 + \rho_2)\Delta x^3}{8\sigma}}$

Tableau 1.1: Les contraintes sur le pas de temps.

Décrivons rapidement la méthode de projection (*Peyret et Taylor 1983*) utilisée pour satisfaire l'incompressibilité dans le code JADIM. La discrétisation temporelle du bilan de quantité de mouvement est écrite sous la forme (*Calmet 1995*) :

$$\frac{\mathbf{V}_i^{n+1} - \mathbf{V}_i^n}{\Delta t} \mathfrak{G} = - \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \xi_i} \right)^{n+1} \mathfrak{G} + \text{Gravité} + \text{Advection} + \text{Diffusion} + \text{Effets capillaires} \quad (1.16)$$

où l'indice n correspond au temps $t=n\Delta t$. On calcule une approximation $\hat{\mathbf{V}}$ de \mathbf{V} en utilisant la pression connue à l'instant précédent, comme suit :

$$\frac{\hat{\mathbf{V}}_i^{n+1} - \mathbf{V}_i^n}{\Delta t} \mathfrak{G} = - \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \xi_i} \right)^n \mathfrak{G} + \text{Gravité} + \text{Advection} + \text{Diffusion} + \text{Effets capillaires} \quad (1.17)$$

Dans l'équation (1.17), la valeur de la pression est celle du pas de temps précédent : elle est connue. Il y a maintenant un vecteur inconnu supplémentaire $\hat{\mathbf{V}}$ qui ne satisfait pas la condition de divergence nulle contrairement à \mathbf{V} . On introduit un potentiel auxiliaire Φ , qui relie $\hat{\mathbf{V}}$ et \mathbf{V} :

$$\frac{\mathbf{V}_i^{n+1} - \hat{\mathbf{V}}_i^{n+1}}{\Delta t} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi_i} \quad (1.18)$$

Remarque :

L'équation (1.18) peut s'écrire aussi en notation vectorielle : $\mathbf{V}^{n+1} = \hat{\mathbf{V}}^{n+1} - \Delta t \cdot \nabla \Phi / \rho$. Si l'on prend le rotationnel de cette équation et si l'on considère la densité constante, le dernier terme s'annule : $\hat{\mathbf{V}}^{n+1}$ possède donc le même rotationnel que \mathbf{V}^{n+1} , tandis que le terme contenant Φ correspond à une correction potentielle. En revanche cette propriété n'est plus vérifiée lorsque ρ varie car les rotationnels de $\hat{\mathbf{V}}^{n+1}$ et \mathbf{V}^{n+1} diffèrent de la contribution barocline $(\nabla \rho \times \nabla \Phi) / \rho^2$.

Résoudre (1.16), (1.17) et (1.18) impose que la pression à l'instant final s'obtienne par :

$$\mathbf{P}^{n+1} = \mathbf{P}^n + \Phi \quad (1.19)$$

Il reste donc à calculer Φ sachant qu'il faut satisfaire la condition d'incompressibilité pour \mathbf{V} c'est-à-dire : $\nabla \cdot \mathbf{V}^{n+1} = 0$. En remplaçant \mathbf{V} par son expression en fonction de $\hat{\mathbf{V}}$ et de Φ on obtient la pseudo-équation de Poisson :

$$\frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \hat{\mathbf{V}}^{n+1} = \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \Phi \right) \quad (1.20)$$

Pour résumer, la méthode de projection comporte trois étapes :

1. Calcul de $\hat{\mathbf{V}}^{n+1}$ via (1.17).
2. Calcul de Φ via la pseudo-équation de Poisson (1.20).
3. Calcul de \mathbf{P}^{n+1} via (1.19) et \mathbf{V}^{n+1} via (1.18).

3) *Résolution de l'équation de transport du taux de présence*

La résolution de l'équation (1.2) fait l'objet de développements nouveaux présentés dans le Chapitre 2. La description qui suit correspond à la méthode initiale développée par *Benkenida 1999*, mais elle reste valable malgré les développements apportés. L'équation à résoudre est :

$$\frac{\partial C(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{V}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla C(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.21)$$

Ici \mathbf{V} est une donnée connue et nous cherchons à calculer C . L'équation (1.21) est résolue par un schéma issu de celui développé par *Zalesak 1979* et qui fait partie de la famille des schémas de type correcteur de flux ou Flux Corrected Transport (FCT) initialement développés pour résoudre des problèmes de chocs (*Boris & Book 1973*). L'équation est mise sous forme conservative pour exploiter au mieux le maillage à variables décalées et calculer précisément les flux advectifs. Elle devient :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C\mathbf{V}) = C\nabla \cdot \mathbf{V} \quad (1.22)$$

En explicitant les différent opérateurs nous obtenons,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial CU}{\partial x} + \frac{\partial CV}{\partial y} + \frac{\partial CW}{\partial z} = C \frac{\partial U}{\partial x} + C \frac{\partial V}{\partial y} + C \frac{\partial W}{\partial z} \quad (1.23)$$

On peut résoudre « directement » cette équation tridimensionnelle, mais *Benkenida 1999* montre qu'avec le schéma de *Zalesak*, les fronts sont alors très distordus. La figure 1.12 présente à titre d'exemple la rotation solide bidimensionnelle d'un cercle pour lequel $C=1$ à l'intérieur, dans le cas où l'on résout l'équation (1.23) par le schéma FCT de *Zalesak 1979*. Les trois lignes d'iso-contours doivent idéalement rester très proches les unes des autres : au vu de la figure 1.12, ce n'est pas le cas.

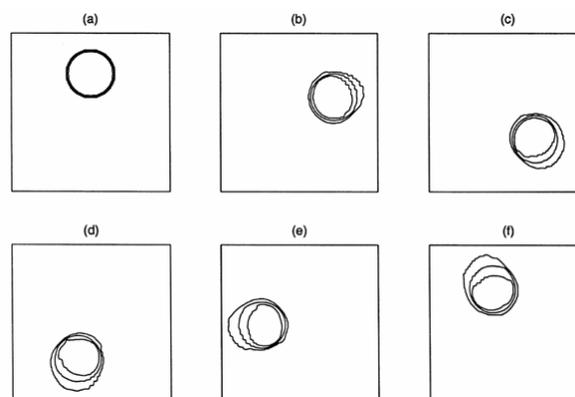


Figure 1.12: Rotation solide d'un disque par résolution de l'équation (1.23) de transport du taux de présence (*Benkenida 1999*). Iso-contours de $C = 0,025 - 0,5 - 0,975$.

Benkenida montre aussi qu'en décomposant la résolution de (1.23) en sous-étapes unidimensionnelles, on s'affranchit du problème. Il modifie le schéma pour résoudre effectivement les équations suivantes :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial CU}{\partial x} = C \frac{\partial U}{\partial x} \quad (1.24 \text{ a})$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial CV}{\partial y} = C \frac{\partial V}{\partial y} \quad (1.24 \text{ b})$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial CW}{\partial z} = C \frac{\partial W}{\partial z} \quad (1.24 \text{ c})$$

Les trois équations sont résolues successivement, en prenant comme condition initiale la solution de l'équation précédente. L'ordre des équations change à chaque pas de temps par permutation circulaire afin de ne privilégier aucune direction. La figure 1.13 présente le même test que précédemment mais en résolvant (1.24). Le transport du front est maintenant correct.

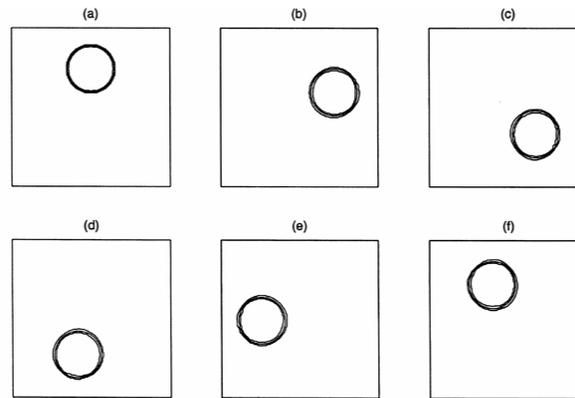


Figure 1.13: Rotation solide d'un disque par résolution « en sous-étapes 1D » de l'équation de transport du taux de présence (Benkenida 1999). Iso-contours de $C = 0,025 - 0,5 - 0,975$.

Ce type de résolution est classique, on parle d'approche à directions découplées (direction split approach). Une telle approche est utilisée par exemple par Gueyffier *et al.* 1999, Welch & Wilson 2000, Renardy *et al.* 2001, Lörstad & Fuchs 2004. Nous nous contentons par la suite de présenter la méthode de résolution d'une des sous-étapes unidimensionnelles, car le traitement est le même pour chaque direction du maillage. Considérons l'équation suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial CU}{\partial x} = C \frac{\partial U}{\partial x} \quad (1.25)$$

Dans le cadre d'une méthode de type Volumes Finis, le domaine est discrétisé en cellules de calcul indicées par i , et le temps en instants indicés par n . On ne considère plus $C(x,t)$ en tout point x à tout instant t , mais C_i^n au point $x=i\Delta x$ à l'instant $t=n\Delta t$, Δx et Δt étant respectivement les pas d'espace et de temps. Toutes les variables (V,P,C) sont connues à $t=n\Delta t$. En intégrant l'équation sur un volume $\mathcal{V}=\mathcal{V}_p$ (P et C sont calculés au même point) dont la taille est celle d'une cellule de calcul, il vient :

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} \vartheta + \frac{(CU)_{i+1/2}^n - (CU)_{i-1/2}^n}{\Delta x} \vartheta = C_i^{n-1} \frac{U_{i+1/2}^n - U_{i-1/2}^n}{\Delta x} \vartheta \quad (1.26)$$

En notant $F = CU \frac{\Delta t}{\Delta x}$ le flux à travers l'une des frontières de la cellule de calcul, l'équation peut être réécrite de la façon suivante :

$$C_i^{n+1} = C_i^n - (F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n) + C_i^n \frac{U_{i+1/2}^n - U_{i-1/2}^n}{\Delta x} \Delta t \quad (1.27)$$

Toute la difficulté réside alors dans le calcul de F , car cela conditionne le caractère dissipatif ou dispersif du schéma. Pour les schémas correcteurs de flux, F est calculé en utilisant une somme de deux flux FL et FH , dont l'un est qualifié d'ordre faible et l'autre d'ordre élevé (L pour Low, H pour High). FL rend le schéma dissipatif mais stable, FH le rend dispersif mais précis. On parle d'étapes « diffusive » pour FL et « anti-diffusive » pour FH . F s'exprime au point $x=(i+1/2).\Delta x$ à l'instant $t=n\Delta t$ par :

$$F_{i+1/2}^n = m_{i+1/2} FH_{i+1/2}^n + (1 - m_{i+1/2}) FL_{i+1/2}^n \quad (1.28)$$

avec

$$FL_{i+1/2}^n = \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{(U_{i+1/2}^n - |U_{i+1/2}^n|) C_{i+1}^n + (U_{i+1/2}^n + |U_{i+1/2}^n|) C_i^n}{2} \quad (1.29)$$

$$FH_{i+1/2}^n = \frac{\Delta t}{\Delta x} U_{i+1/2}^n \left[\frac{533}{840} (C_{i+1}^n + C_i^n) - \frac{139}{840} (C_{i+2}^n + C_{i-1}^n) + \frac{29}{840} (C_{i+3}^n + C_{i-2}^n) - \frac{1}{280} (C_{i+4}^n + C_{i-3}^n) \right] \quad (1.30)$$

où $m_{i+1/2}$ est un coefficient qui est compris entre 0 et 1 et qui dépend de C et de ses variations.

Remarque :

Si $m_{i+1/2}=0$, le schéma FCT est équivalent à un schéma de type centré-amont. De plus, FH est calculé à l'ordre 8 partout où les mailles sont régulières ; il dégénère à l'ordre 4 sinon.

Comment est calculé $m_{i+1/2}$?

1. Pour tous les points du domaine, on calcule FL et FH et on déduit :

$$\tilde{C}_i = C_i^n - (FL_{i+1/2}^n - FL_{i-1/2}^n) + C_i^n \frac{U_{i+1/2}^n - U_{i-1/2}^n}{\Delta x} \Delta t \quad (1.31)$$

$$C_i^a = \max(C_i^n, \tilde{C}_i) \quad (1.32)$$

$$C_i^{\max} = \max(C_{i-1}^a, C_i^a, C_{i+1}^a) \quad (1.33)$$

$$C_i^b = \min(C_i^n, \tilde{C}_i) \quad (1.34)$$

$$C_i^{\min} = \min(C_{i-1}^b, C_i^b, C_{i+1}^b) \quad (1.35)$$

2. On détermine ensuite :

$$S_{i+1/2} = \text{signe}(\tilde{C}_{i+1} - \tilde{C}_i) \quad (1.36)$$

$$\phi_{i+1/2} = S_{i+1/2} \max\left\{0, \min\left[|FH_{i+1/2}^n - FL_{i+1/2}^n|, S_{i+1/2}(\tilde{C}_i - \tilde{C}_{i-1}), S_{i+1/2}(\tilde{C}_{i+2} - \tilde{C}_{i+1})\right]\right\} \quad (1.37)$$

Remarque :

ϕ est qualifié de « flux anti-diffusif »

3. On calcule les grandeurs suivantes :

$$P_i^+ = \max(0, \phi_{i-1/2}) - \min(0, \phi_{i+1/2}) \quad (1.38)$$

$$Q_i^+ = (C_i^{\max} - \tilde{C}_i) \quad (1.39)$$

$$R_i^+ = \begin{cases} \min(1, Q_i^+ / P_i^+) & \text{si } P_i^+ > 0 \\ 0 & \text{si } P_i^+ = 0 \end{cases} \quad (1.40)$$

$$P_i^- = \max(0, \phi_{i+1/2}) - \min(0, \phi_{i-1/2}) \quad (1.41)$$

$$Q_i^- = (\tilde{C}_i - C_i^{\min}) \quad (1.42)$$

$$R_i^- = \begin{cases} \min(1, Q_i^- / P_i^-) & \text{si } P_i^- > 0 \\ 0 & \text{si } P_i^- = 0 \end{cases} \quad (1.43)$$

4. On détermine enfin $m_{i+1/2}$:

$$m_{i+1/2} = \begin{cases} \min(R_{i+1}^+, R_i^-) & \text{si } \phi_{i+1/2} \geq 0 \\ \min(R_i^+, R_{i+1}^-) & \text{si } \phi_{i+1/2} < 0 \end{cases} \quad (1.44)$$

Le schéma est précis à l'ordre 2 en espace et 1 en temps (*Benkenida 1999*).

Résumé global de la méthode de suivi utilisée

On connaît V^n , P^n et C^n .

On résout l'équation du taux de présence : C^{n+1} est connue.

On calcule la masse volumique et la viscosité du fluide : μ^{n+1} et ρ^{n+1} sont connues.

On calcule les grandeurs intermédiaires $\mu^{n+1/2} = (\mu^n + \mu^{n+1})/2$, $\rho^{n+1/2} = (\rho^n + \rho^{n+1})/2$ et $C^{n+1/2} = (C^n + C^{n+1})/2$.

On détermine la partie rotationnelle de la vitesse avec les grandeurs précédentes : \hat{V}^{n+1} est connue.

On résout la pseudo-équation de Poisson : V^{n+1} et P^{n+1} sont connues.

L'ensemble de l'algorithme conduit à une solution précise à $O(\Delta t, \Delta x^2)$. L'outil numérique tel qu'il est présenté permet de simuler efficacement certains écoulements di- et triphasiques en deux et trois

dimensions (*Benkenida 1999, Cranga 2002*). Cependant le champ d'application de la méthode reste limité aux phénomènes dont les temps caractéristiques sont courts (impact de bulle, coalescence, percement d'interface) car comme pour les autres codes basés sur la même famille de méthodes, il y a une érosion progressive de la raideur des interfaces au fur et à mesure de l'avancement de la simulation, ce qui empêche l'investigation de phénomènes présentant des temps caractéristiques longs ou nécessitant d'atteindre un état quasi-stationnaire. L'un des buts essentiels de cette thèse est de lever cette limitation.

Chapitre 2

Amélioration de la technique de capture de l'interface

I. Position du problème et solutions adoptées

Cette partie est consacrée à la présentation des problèmes numériques inhérents à la méthode de capture de front sans reconstruction et aux solutions apportées.

1) *Position du problème*

Comme nous l'avons déjà souligné, la technique de capture des interfaces développée par *Benkenida 1999* dans JADIM présente des limitations. La première concerne la non-conservation exacte de la masse des fluides, la seconde l'érosion progressive de la raideur des interfaces au fur et à mesure de la simulation. Avant d'entrer plus avant dans les détails, nous nous devons de définir les notions d'interface et d'érosion de la raideur des fronts, car elles sont au cœur du problème à résoudre. L'interface est définie comme la région de discontinuité des propriétés physiques du milieu, ce qui correspond numériquement aux cellules de calcul où le taux de présence est strictement compris entre zéro et un. Cette interface a théoriquement une épaisseur nulle. Cependant, une fois discrétisée cette discontinuité devient une zone de transition dans laquelle les propriétés physiques varient très rapidement et l'épaisseur de cette zone devient de l'ordre de trois cellules de calcul. On parle d'érosion de la raideur des fronts quand l'épaisseur de cette zone dépasse ce nombre de cellules. Il y a alors un écartement important des iso-contours extrêmes, disons $C=0,01$ et $C=0,99$.

L'exemple suivant met en évidence les deux limitations de la méthode numérique. Considérons la simulation de la montée d'une bulle de gaz dans un liquide initialement au repos. La configuration de départ est donnée par la figure 2.1.



Figure 2.1: Configuration initiale correspondant à l'ascension d'une bulle sphérique dans un liquide initialement au repos. Iso-contours de taux de présence $C=0,01-0,5-0,99$.

La bulle de forme sphérique a une vitesse initiale nulle et l'on fixe les rapports de densité et de viscosité ρ_l/ρ_g et μ_l/μ_g à 100 (l'indice l désigne le liquide, l'indice g le gaz). Dans ces conditions on peut considérer que la masse volumique ρ_g et la viscosité μ_g du gaz contenu dans la bulle ont des effets négligeables devant ceux du liquide environnant. Ce problème peut donc être décrit par deux paramètres adimensionnels :

Le nombre de Morton : $M = \frac{g\mu_l^4}{\rho_l\sigma^3}$ fixé ici à $5,27 \cdot 10^{-6}$. (2.1)

Le nombre de Bond : $Bo = \frac{\rho_l g d^2}{\sigma}$ fixé à 11,4. (2.2)

Le nombre Morton (ou nombre de Kapitsa) est caractéristique des fluides en présence, le nombre de Bond (aussi appelé nombre d'Eötvös) compare l'importance des effets de flottabilité à celle des effets capillaires. Sous l'effet de la gravité la bulle monte et se déforme (car $Bo > 1$). La figure 2.2 présente d'une part la forme de la bulle à différents instants et d'autre part l'évolution de la variation relative de sa masse. La masse de la bulle est donnée par : $m(t) = \int_{\mathcal{V}} \rho_g C(\mathbf{x}, t) d\mathcal{V}$, C étant la fraction volumique du gaz et \mathcal{V} le volume du domaine de calcul. On note m_0 la masse initiale de la bulle.

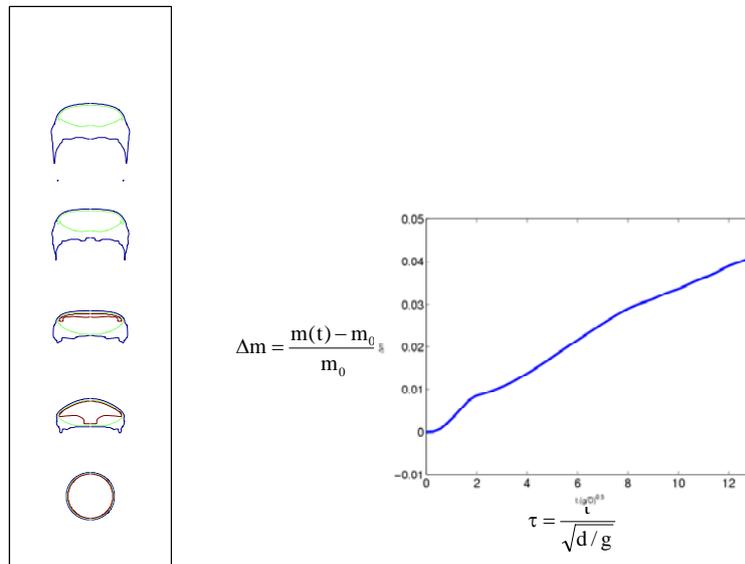


Figure 2.2: A gauche : évolution de la forme de la bulle. (Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$). A droite : évolution de la variation relative de masse de la bulle.

Au regard de la figure de gauche, les trois iso-contours représentés s'écartent fortement les uns des autres dès que la bulle a parcouru une distance équivalente à deux fois son diamètre : l'interface s'étale rapidement. Au regard de la figure de droite, la variation relative de masse n'est pas nulle au cours du temps et elle atteint 4% au bout d'une douzaine de temps inertiels : la masse du gaz et donc celle du liquide puisque $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$, ne sont pas conservées. Les deux problèmes trouvent leur source dans l'étape de transport de l'interface. La figure 2.3 illustre la problématique.

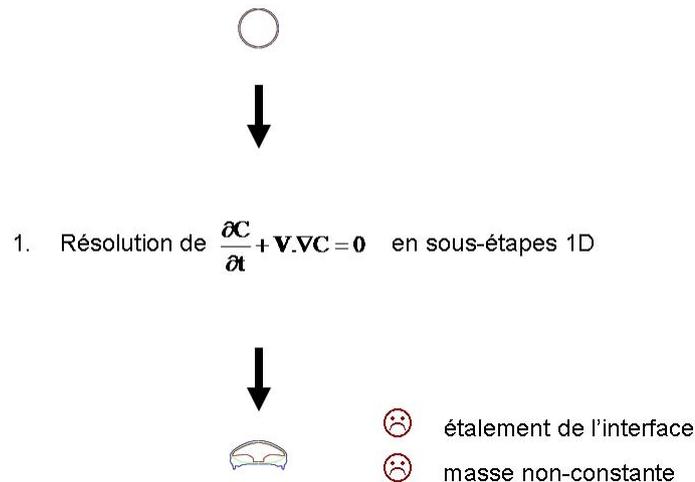


Figure 2.3: Les limitations de la méthode de transport du taux de présence.

2) Conservation de la masse des fluides

Considérons la première limitation de la méthode : la non-conservation de la masse. La plupart des méthodes numériques de suivi d'interface rencontrent ce problème même si c'est pour des raisons différentes : *Zhou & Pozrikidis 1993* l'évoquent pour les méthodes de type éléments de frontières, *Sussman et al. 1998* pour la méthode Level Set, *Renardy et al. 2001* pour les méthodes Volume Of Fluid dans lesquelles l'étape de reconstruction de l'interface est subdivisée en sous-étapes monodimensionnelles, et *Bunner & Tryggvason 2002* pour les méthodes de type Front Tracking. Pourquoi la masse n'est elle pas conservée ? Dans le cas des méthodes de type éléments de frontière et Front Tracking, le problème vient du fait que les schémas utilisés ne sont pas explicitement conservatifs. Pour les méthodes de type Level Set, c'est l'étape de « réinitialisation » qui modifie la masse des fluides. Enfin pour la méthode décrite au Chapitre 1, les schémas numériques sont au départ explicitement conservatifs mais le découplage de la résolution de l'équation de transport de C en sous-étapes unidimensionnelles fait perdre cette propriété au schéma global.

Pour bien le comprendre, discrétisons dans le domaine temporel l'équation de transport de C non découplée (1.23) et les équations découplées (1.24). Pour plus de clarté, elles sont écrites sous forme non-conservative, mais le raisonnement reste le même. L'instant initial est noté $t_n = n \cdot \Delta t$, l'instant final $t_{n+1} = (n+1) \cdot \Delta t$, et les temps intermédiaires t^* et t^{**} . L'équation (1.23) devient :

$$\frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} + U^n \frac{\partial C^n}{\partial x} + V^n \frac{\partial C^n}{\partial y} + W^n \frac{\partial C^n}{\partial z} = 0 \quad (2.3)$$

Tandis que les équations (1.24) deviennent :

$$\frac{C^* - C^n}{\Delta t} + U^n \frac{\partial C^n}{\partial x} = 0 \quad (2.4 \text{ a})$$

$$\frac{C^{**} - C^*}{\Delta t} + V^n \frac{\partial C^*}{\partial y} = 0 \quad (2.4 \text{ b})$$

$$\frac{C^{n+1} - C^{**}}{\Delta t} + W^n \frac{\partial C^{**}}{\partial z} = 0 \quad (2.4 \text{ c})$$

En sommant les équations (2.4) on obtient :

$$\frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} + U^n \frac{\partial C^n}{\partial x} + V^n \frac{\partial C^*}{\partial y} + W^n \frac{\partial C^{**}}{\partial z} = 0 \quad (2.5)$$

Les équations (2.3) et (2.5) ne sont pas équivalentes car C^n , C^* et C^{**} ne sont pas égaux en tout point du domaine. Par conséquent l'équation (2.5) n'est plus conservative puisque $\int_{\mathcal{D}} C^{n+1} d\mathcal{D}$ n'est pas égal à $\int_{\mathcal{D}} C^n d\mathcal{D}$. Le découplage du transport de C crée ainsi des petites modifications de la masse des fluides qui peuvent devenir non négligeables si le temps de simulation est grand.

Remarque :

Quand le pas de temps tend vers 0, $C^{**} \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} C^* \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} C^n$: le transport à directions découplées devient asymptotiquement équivalent au schéma à directions non découplées.

Modification de la fraction volumique dans les zones de transition à la fin du transport de C .

La solution adoptée pour conserver la masse des fluides consiste à modifier localement la fraction volumique C de sorte que la masse globale des fluides reste constante. Une stratégie similaire est appliquée par *Chang et al. 1996* pour améliorer la conservation globale dans le cas des méthodes de type Level Set. Soit $\Delta m(t)$ la variation relative de la masse du fluide 1 associé au taux de présence C dans le volume du domaine de calcul \mathcal{D} :

$$\Delta m(t) = \frac{\int_{\mathcal{D}} \rho_1 (C(\mathbf{x}, t) - C(\mathbf{x}, t = 0)) d\mathcal{D}}{\int_{\mathcal{D}} \rho_1 C(\mathbf{x}, t = 0) d\mathcal{D}} \quad (2.6)$$

La méthode consiste à remplacer localement C par \tilde{C} de la façon suivante :

$$\tilde{C}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} \min(\alpha \cdot C(\mathbf{x}, t), 1) & \text{si } \Delta m(t) < -\Delta m_C \\ C(\mathbf{x}, t) & \text{si } |\Delta m(t)| \leq \Delta m_C \\ 1 - \min[\alpha \cdot (1 - C(\mathbf{x}, t)), 1] & \text{si } \Delta m(t) > +\Delta m_C \end{cases} \quad (2.7)$$

α est un réel ($\alpha \geq 1$) calculé itérativement jusqu'à ce que le critère $|\Delta m| \leq \Delta m_C$ soit satisfait. Δm_C est le paramètre ($\Delta m_C > 0$) qui contrôle le degré de précision de la conservation de la masse.

A la suite de plusieurs tests, nous avons déterminé que $\Delta m_C = 10^{-3}$ était suffisant et dans tous les cas nous avons observé que l'erreur de masse correspondante n'avait pas d'effet sur la dynamique des écoulements. Toutefois rien n'empêche d'imposer un critère plus restrictif dans les cas où l'on souhaite conserver la masse avec plus de rigueur. Soulignons que *Bunner & Tryggvason 2002* ont aussi trouvé qu'une variation relative de masse de 10^{-3} n'affectait pas leurs résultats. En pratique, la modification (2.7) s'effectue environ tous les 20 à 50 pas de temps et α converge très rapidement en moins d'une dizaine d'itérations. Plusieurs tests sur des maillages 2D de dimension 60x60 à 150x80 de simulations de rupture de barrage, de montée de bulles et d'oscillations de bulles ont montré que pour la gamme $\Delta m_C = 10^{-3} - 10^{-6}$, le temps de simulation nécessaire à la conservation de la masse des fluides est inférieur à 2% du temps de simulation total (voir le tableau 2.1).

Δm_C	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}
$t_{\text{masse}} / t_{\text{CPU}}$	0,14 %	0,3 %	0,9 %	1,5 %

Tableau 2.1: Temps de calcul nécessaire à la procédure (2.7).

La figure 2.4 présente une distribution unidimensionnelle de \tilde{C} pour différentes valeurs de α dans les cas (a) $|\Delta m| \leq \Delta m_C$, (b) $\Delta m < -\Delta m_C$, (c) $\Delta m > \Delta m_C$. Elle permet de vérifier que les bonnes propriétés du schéma sont conservées : d'une part la position de l'interface n'est pas modifiée dans le sens où la zone pour laquelle $0 < \tilde{C} < 1$ est incluse dans celle pour laquelle $0 < C < 1$, d'autre part la raideur des fronts est conservée voire accentuée (comparer par exemple les cas $\alpha=1$ et $\alpha=1000$ de la figure 2.4b). Une condition nécessaire au bon fonctionnement de cette technique est que l'interface soit suffisamment épaisse pour permettre d'ajouter ou de retrancher la quantité de masse suffisante. Tous les calculs réalisés ont rempli cette condition et il paraît peu réaliste que les fronts deviennent trop raides au cours de la simulation car la diffusion n'est jamais complètement supprimée (l'épaisseur de la zone de transition $0,01 < C < 0,99$ est généralement de trois cellules de calcul).

Le seul inconvénient de cette méthode réside dans son caractère global, c'est-à-dire que l'on assure la conservation de la masse des fluides dans tout le domaine (comme l'ont fait *Chang et al. 1996*) mais si le fluide comporte plusieurs inclusions, (2.7) peut ne pas conserver strictement la masse de chaque inclusion de façon individuelle. Pour illustrer ce point nous considérons trois bulles de diamètres très différents en ascension dans une colonne de liquide (figure 2.5a). Ces bulles sont discrétisées avec respectivement dix, vingt et quarante cellules de calcul par diamètre. Nous activons la procédure (2.7) et nous mesurons la masse respective de chaque bulle au cours du temps (figure 2.5c). A $t(\text{g/d})^{1/2}=24$, la variation relative de masse est de 80%, 5,8% et 0,5% pour les bulles 1, 2, et 3 respectivement. De fait, le volume occupé par la région de transition Ω telle que $0 < C < 1$

rapporté au volume total de la bulle est d'autant plus grand que la bulle est petite. Modifier le taux de présence, et par voie de conséquence la masse de la bulle, dans le volume de transition Ω est donc plus dramatique pour les petites bulles. Il est possible d'imaginer une méthode de détermination logique des cellules occupées par chaque inclusion, pour lesquelles on appliquerait (2.7) à chacun des sous-domaines, mais cette méthode échoue dès qu'il y a des phénomènes de rupture ou de coalescence. De plus les tentatives pour conserver la masse localement se sont soldées par la perte de la monotonie du schéma de transport (des valeurs de $C > 1$ ou $C < 0$ apparaissent au cours du transport). Il n'en reste pas moins que la méthode (2.7) est une alternative efficace pour conserver la masse des fluides dans beaucoup de configurations complexes.

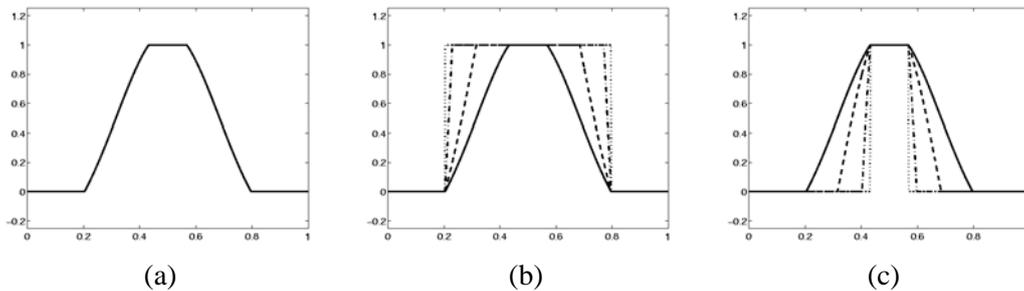


Figure 2.4: Modification de C induite par la procédure (2.7).

(a) $|\Delta m| \leq \Delta m_C$ (b) $\Delta m < -\Delta m_C$ (c) $\Delta m > \Delta m_C$
 (—) $\alpha=1$ (---) $\alpha=2$ (-.-.) $\alpha=10$ (...) $\alpha=1000$.

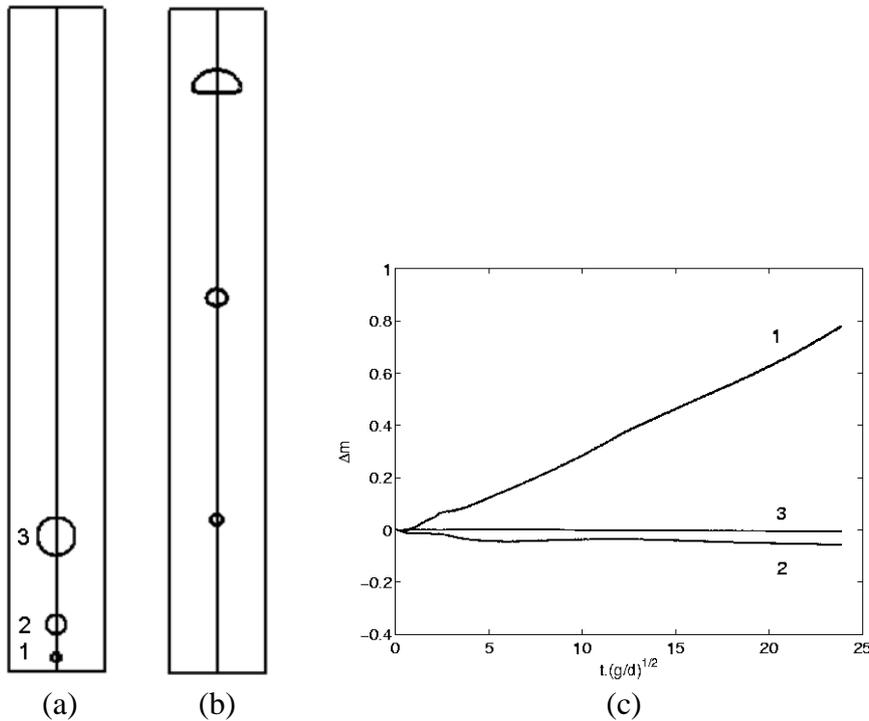
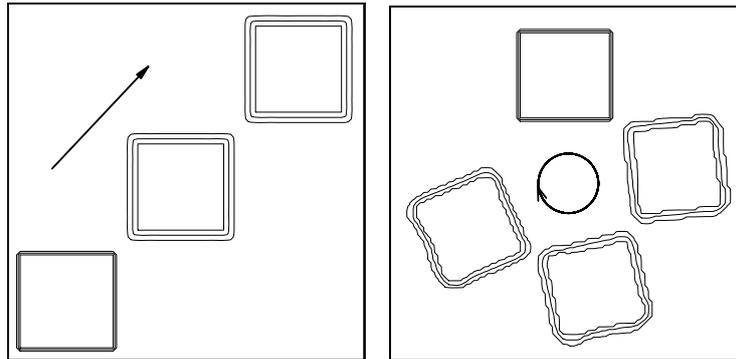


Figure 2.5: Limitation de la technique de conservation de la masse. (a) Position et forme initiales des bulles. (b) Position et forme finales. (c) Evolution de la masse des trois bulles.

3) Conservation de la raideur des fronts

Pour définir précisément la nature du problème, nous nous appuyons sur les observations faites par *Benkenida 1999* qui montre que la raideur n'est pas altérée au cours des simulations par la translation ou la rotation comme illustré sur la figure 2.6. Il montre aussi que l'étalement des fronts a lieu essentiellement dans les zones d'étirement.



(a)

(b)

Figure 2.6: Tests de transports du taux de présence.

Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$; maillage 100×100 .

(a) Translation $U=1$ $V=1$. (b) Rotation solide $U=-y$ $V=x$.

Nous présentons sur la figure 2.7 le transport d'un rectangle dans un écoulement d'étirement pur. Les composantes du champ de vitesse sont $U=ax$, $V=-ay$ ($a>0$) avec $x=y=0$ dans le coin bas gauche de la figure. Les valeurs propres du tenseur $\nabla \mathbf{V}$ sont a et $-a$ et les vecteurs propres associés sont $\lambda_a = \mathbf{e}_1$ et $\lambda_{-a} = \mathbf{e}_2$ où \mathbf{e}_1 et \mathbf{e}_2 sont respectivement les vecteurs unitaires parallèles aux lignes de maillage $y=\text{constante}$ et $x=\text{constante}$. Le rectangle subit d'abord une compression dans la direction y (figure 2.7a) et se transforme en un carré quand il arrive à proximité du point hyperbolique $x=y=0$ (figure 2.7b). Au cours de cette étape les fronts restent raides. Le carré s'écarte alors du point hyperbolique et commence à subir un étirement suivant la direction x (figure 2.7c), pour finalement reprendre sa forme initiale de façon symétrique par rapport à l'axe $x=y$ (figure 2.7d). Tandis que l'épaisseur des fronts supérieur, inférieur et du front de droite reste raisonnable, le front de gauche s'est considérablement étalé.

Nous pouvons déduire de cet exemple plusieurs enseignements intéressants sur le mécanisme d'érosion des fronts. Tout d'abord, les fronts horizontaux restent raides tout au long du transport. Ces fronts sont constamment orthogonaux à λ_a (ils sont comprimés) tandis qu'ils peuvent être soit perpendiculaires à \mathbf{V} (figure 2.7a) soit parallèles à \mathbf{V} (figure 2.7d). Nous pouvons donc conclure que les fronts comprimés restent raides quel que soit l'angle qu'ils font avec la vitesse du fluide. Ensuite nous observons sur les figures 2.7a-b que les fronts verticaux restent raides tandis que sur les figures 2.7c-d le front de gauche s'étale. Ces fronts sont tous orthogonaux à λ_{-a} . Cependant dans les deux premiers cas la vitesse est quasi-parallèle aux fronts tandis que dans les deux derniers cas

elle leur est quasi-perpendiculaire. Il semble donc que les fronts s'étalent quand ils sont orthogonaux à la fois à \mathbf{V} et à λ_a . Enfin il est clair au vu de la figure 2.7d que l'étalement est plus important du côté gauche du rectangle que du côté droit car l'étirement est d'autant plus grand que le point hyperbolique est proche. Nous pouvons mesurer cet effet en introduisant une longueur caractéristique d'étirement $\delta = \sqrt{(U^2 + V^2)}/a$; plus δ est faible, plus l'étirement est grand. Pour résumer la figure 2.7 nous apprend que la situation la plus dangereuse vis-à-vis de l'étalement des fronts correspond au cas où le front est traversé par un écoulement à faible vitesse dont le taux d'étirement local est grand.

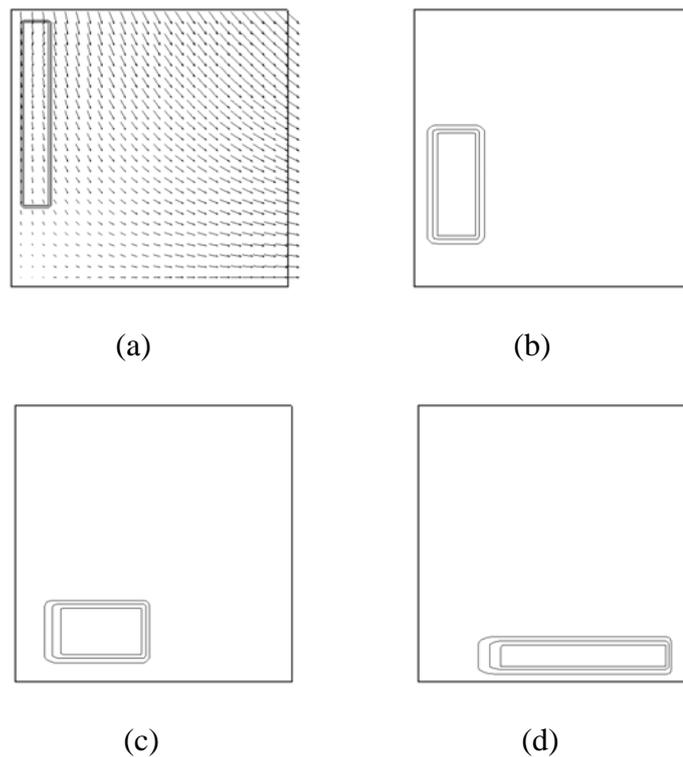


Figure 2.7: Tests de transport du taux de présence.
 Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$; maillage 100×100 .
 Etirement pur $U=x$ $V=-y$.

Que se passe-t-il localement ?

Rappelons que la zone de transition est définie sur plusieurs cellules de calcul (au minimum deux cellules, une où $C=0$ et une où $C=1$). La figure 2.8 représente en trait plein un front à l'instant t_0 étalé sur 5 cellules. Dans un écoulement en présence d'étirement, la vitesse en chaque point de ce front diffère ; les points où le taux de présence est proche de 0 ont ici une vitesse plus faible que ceux dont le taux de présence est proche de 1 : ils vont donc s'écartier les uns des autres. A l'instant t_1 , la pente du front est moins grande et l'épaisseur de la zone de transition augmente.

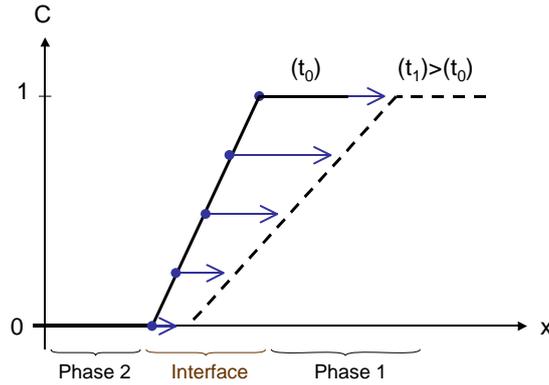


Figure 2.8: Mécanisme d'érosion des fronts.

Pour s'en convaincre, nous présentons sur la figure 2.9 un exemple de transport d'une marche d'escalier dans un écoulement à fort étirement avec le schéma de transport initialement implanté dans JADIM.

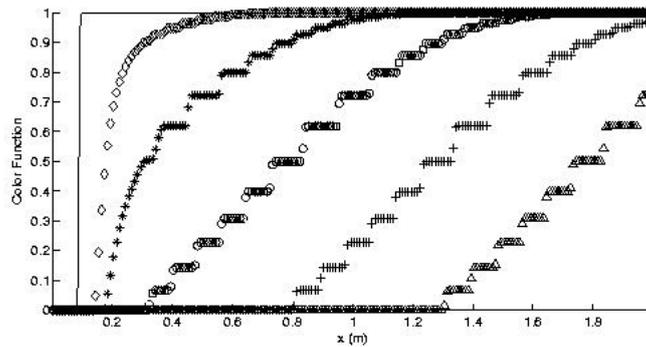


Figure 2.9: Transport d'une marche d'escalier (initialement en trait plein) par un écoulement à fort étirement $U(x)=exp[-5exp(-25x^2)]$ à différents instants (symboles). $\Delta x=1/100$.

Il faut souligner que c'est bien l'étirement adimensionnel qui est le paramètre important dans le phénomène d'érosion des fronts. Ainsi un champ de vitesse peut beaucoup varier sans forcément être le siège de forts étirements et dans ce cas les fronts restent raides. A titre d'illustration, reprenons le test de transport unidimensionnel de la marche d'escalier pour deux vitesses U_1 et U_2 , définies par $U_1(x)=ax$ et $U_2(x)=U_0 \exp(bx)$. L'étirement adimensionnel S_x dans la direction x

est défini tel que : $S_x = \frac{\Delta x}{U} \frac{dU}{dx}$, où Δx est le pas d'espace. Il vient : $S_{1x} = \frac{\Delta x}{U_1} \frac{dU_1}{dx} = \frac{\Delta x}{x}$ et

$S_{2x} = \frac{\Delta x}{U_2} \frac{dU_2}{dx} = b\Delta x$. La figure 2.10 représente U_1 et U_2 à gauche et S_{1x} et S_{2x} à droite ($\Delta x=0,02$;

$a=b=U_0=1$).

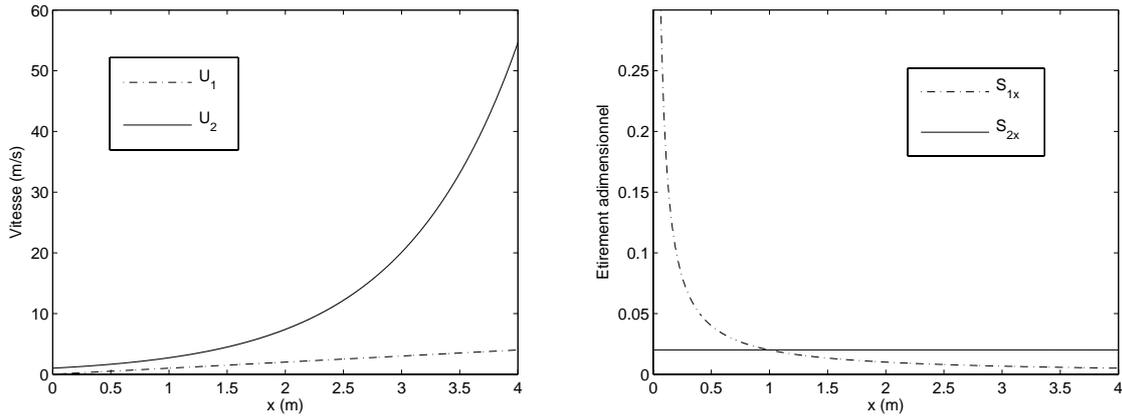


Figure 2.10: A gauche : Vitesses $U_1=ax$, $U_2= U_0exp(bx)$.
A droite : Etirements correspondant $S_{1x}=\Delta x/x$, $S_{2x}=b\Delta x$.

D'une part, U_1 augmente bien plus lentement que U_2 , d'autre part pour $x < 1$, S_{1x} est bien supérieur à S_{2x} . Plaçons un front initialement en $x=0,08$. La figure 2.11 montre l'évolution de la marche d'escalier à différents instants pour les deux champs de vitesse.

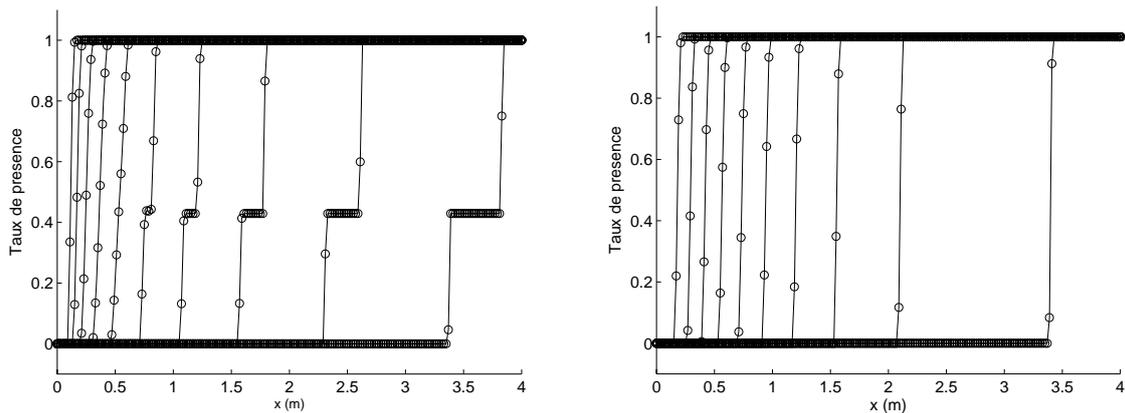


Figure 2.11: Taux de présence à différents instants.
A gauche : $U_1=ax$. A droite : $U_2=U_0exp(bx)$.

Au regard de la figure 2.11, le front s'étale lorsqu'il est transporté par U_1 et reste raide dans le champ de vitesse U_2 ! Dans le premier cas le front était initialement dans une région où l'étirement adimensionnel valait 0,25 tandis que dans le second cas l'étirement adimensionnel valait 0,02. Ceci confirme que c'est bien l'étirement adimensionnel qui contrôle l'étalement des fronts et qu'il existe une valeur critique à partir de laquelle cet étalement a lieu. Des tests supplémentaires pour lesquels nous prenons $U=U_1$ et où nous faisons varier la position initiale x_0 du front, ou bien dans lesquels nous fixons x_0 et faisons varier la valeur α de $U=U_0(ax)^\alpha$, montrent que (pour deux Δx différents) l'ordre de grandeur de l'étirement adimensionnel critique est $S_{x_critique} \sim 0,1$. Il est fort probable que cette valeur dépende de l'ordre du schéma (ou des flux calculés) car des tests supplémentaires ont permis d'observer un meilleur transport des fronts quand l'ordre des flux augmente.

Pour revenir au problème de l'érosion des fronts, nous pouvons conclure qu'il est le fruit :

1. d'une zone de transition étalée sur au moins deux cellules de calcul.
2. d'un écoulement perpendiculaire à celle-ci dont la vitesse est faible et l'étirement grand.

Il paraît alors naturel de modifier l'une de ces caractéristiques pour espérer s'affranchir de ce problème. On peut par exemple modifier la définition de l'interface pour la rendre « d'épaisseur nulle » sans toucher à l'étirement de l'écoulement : c'est le principe des méthodes de type Level Set pour lesquelles l'interface est définie comme la valeur zéro de la fonction Level Set. Inversement, on peut modifier la nature de l'écoulement en « cassant l'étirement » sans toucher à l'interface : c'est le choix qui est fait ici. Pour casser l'étirement nous rendons la vitesse localement constante dans la zone de transition. La figure 2.12 (qui doit être comparée à la figure 2.8) illustre le principe de cette méthode : tous les points de l'interface ont une vitesse constante, forçant le front à rester raide.

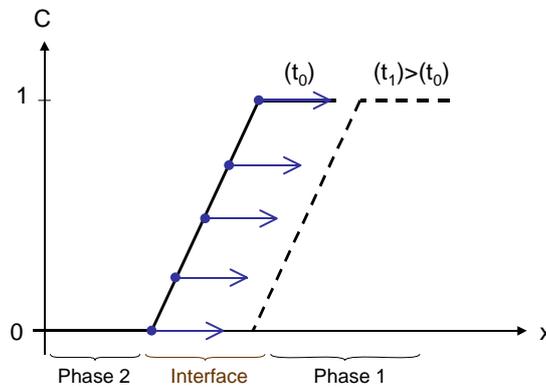


Figure 2.12: La technique de suppression de l'étirement dans la zone de transition.

Modification du champ de vitesse dans les zones de transition.

Soit Ω la région interfaciale telle que $0 < C < 1$. On considère la $i^{\text{ème}}$ étape unidimensionnelle ($i=1,3$) de transport de la fraction volumique. Soit α l'angle entre la $i^{\text{ème}}$ direction du maillage de normale unitaire \mathbf{e}_i et ∇C . Soit β l'angle entre \mathbf{V} et ∇C (voir figure 2.13). A chaque étape, C et Ω changent et nous transportons les fronts par le champ de vitesse $\tilde{\mathbf{V}}$ calculé à partir de \mathbf{V} de la façon suivante :

$$\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} \mathbf{V}(\mathbf{x}, t) & \text{si } \mathbf{x} \notin \Omega \\ \mathbf{V}(\mathbf{x}_0, t) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega \end{cases} \quad (2.8)$$

où \mathbf{x}_0 est le point le plus proche de \mathbf{x} qui satisfasse aux deux conditions :

1. \mathbf{x}_0 est sur la même ligne de courant que \mathbf{x} (respectivement sur la $i^{\text{ème}}$ ligne du maillage passant par \mathbf{x}) si $|\cos(\alpha)|$ est inférieur (respectivement supérieur) à $|\cos(\beta)|$.
2. $C(\mathbf{x}_0) = 0,5$.

Les paragraphes suivant vont permettre de justifier ces choix.

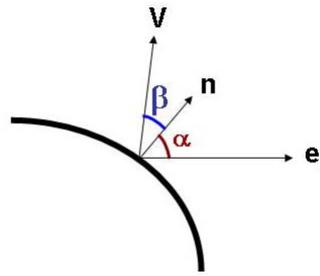


Figure 2.13: Définition des angles α et β .

Choix du critère $C(\mathbf{x}_0)=0,5$

Durant les simulations, les zones de transition s'étalent sur environ trois cellules de calcul. Si l'écoulement est non-uniforme, les vitesses sont différentes dans chaque cellule et varient dans une gamme dépendant des vitesses des cellules à faible taux de présence jusqu'aux cellules à fort taux de présence. L'une de ces valeurs correspond à la vitesse « physique » de l'interface, c'est-à-dire à la vitesse de l'interface si celle-ci était sans épaisseur, et cette vitesse est indépendante du maillage. La figure 2.14 présente le transport d'une marche d'escalier dans un écoulement élongationnel pour différentes résolutions spatiales. Comme prévu, le front s'étale (aucune modification de la vitesse n'est introduite ici), et il est d'autant plus raide que le maillage est raffiné. Il est de plus clair que les fronts se coupent pour une valeur du taux de présence égale à 0,5 pour tous les maillages et que cela correspond à la position théorique du saut de C . C'est de plus consistant avec le caractère symétrique du schéma de transport utilisé, notamment avec le calcul des flux qui est centré en espace dans le schéma de Zalesak. Nous pouvons donc conclure que la valeur physique de l'interface est celle qui correspond à $C=0,5$. C'est pourquoi nous choisissons \mathbf{x}_0 de sorte que $C(\mathbf{x}_0)=0,5$.

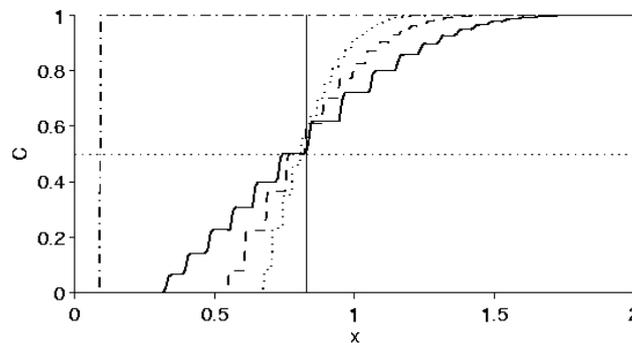


Figure 2.14: Transport d'une marche de C par $U(x)=\exp[-5\exp(-25x^2)]$.

(- - - -) Condition initiale ; (—) Solution théorique à $t=3,5$.

Résultats obtenus avec le schéma original ($\tilde{\mathbf{V}}=\mathbf{V}$) à $t=3,5$:

(—) $\Delta x=1/100$; (- - - -) $\Delta x=1/200$; (....) $\Delta x=1/400$.

Sélection de la direction de $\mathbf{x}-\mathbf{x}_0$

Dans l'exemple unidimensionnel de la figure 2.12, la question du choix de la direction dans laquelle on doit rechercher \mathbf{x}_0 pour modifier la vitesse en un point \mathbf{x} donné ne se pose pas. En revanche, en deux et trois dimensions, on peut se demander dans quelle direction rechercher \mathbf{x}_0 . Plusieurs candidats apparaissent naturellement. Nous avons déjà souligné le rôle de l'orientation du front (défini par ∇C) par rapport à la vitesse locale \mathbf{V} et les vecteurs propres de $\nabla \mathbf{V}$. Il semble donc naturel de choisir la direction fournie par une de ces quantités pour déterminer $\mathbf{x}-\mathbf{x}_0$. Cependant les vecteurs propres de $\nabla \mathbf{V}$ ont une partie imaginaire non nulle quand l'écoulement est elliptique et non hyperbolique (comme c'est par exemple le cas de l'écoulement en rotation solide) et il devient difficile d'exploiter ces vecteurs pour traiter tous les types d'écoulements. A l'inverse les iso-coordonnées $x_i=\text{constante}$ ($i=1,3$) du maillage jouent un rôle particulier dans l'algorithme de transport de C à directions découplées, car ces directions sont utilisées pour avancer la fraction volumique dans le temps. Par conséquent, il reste principalement trois candidats, comme l'illustre la figure 2.15 sur un cas particulier.

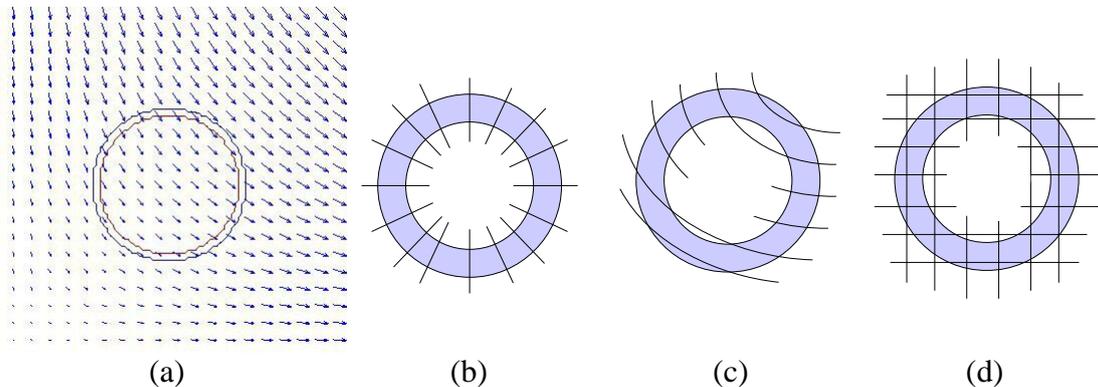


Figure 2.15: Les candidats pour la détermination de \mathbf{x}_0 . (a) Une interface circulaire dans un écoulement d'étirement pur. (b) directions parallèles à ∇C ; (c) lignes de courant; (d) lignes du maillage. La zone grise représente la région de transition Ω .

Le choix le plus évident est d'aligner $\mathbf{x}-\mathbf{x}_0$ avec la direction du gradient de taux de présence. Néanmoins, il apparaît des erreurs dans l'évaluation de ∇C principalement dans les régions où la courbure est très importante, conduisant à des erreurs dans la détermination de \mathbf{x}_0 . La figure 2.16 montre comment un carré évolue dans un écoulement d'étirement unidimensionnel quand \mathbf{x}_0 est choisi en imposant à $\mathbf{x}-\mathbf{x}_0$ d'être parallèle à la direction de ∇C . Nous remarquons que les coins s'étalent au cours de la simulation et que la forme rectangulaire n'est plus maintenue. Il faut souligner que *Adalsteinsson & Sethian 1999* et *Gomes & Faugeras 2000* utilisent les directions de ∇C pour modifier le champ de vitesse nécessaire afin de maintenir le gradient de la fonction Level à la valeur unité. Cependant ils considèrent dans leurs simulations des fronts dont la courbure est modérée et pour lesquelles le problème mis en évidence dans la figure 2.16 ne se pose pas. Comme nous voulons transporter des interfaces qui peuvent avoir dans certaines régions des courbures très fortes, nous éliminons le choix correspondant à la direction ∇C .

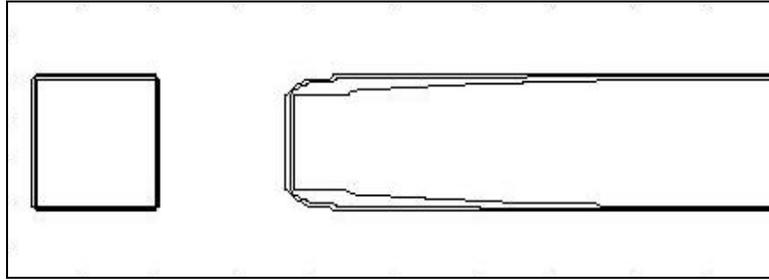


Figure 2.16: Transport d'un rectangle dans un écoulement à fort étirement $U(x)=\exp[-5\exp(-25x^2)]$ avec \mathbf{x}_0 déterminé en utilisant les directions de ∇C . A gauche : condition initiale. A droite : solution finale (une partie du rectangle est hors du domaine). Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$. Maillage 200×70 .

Ensuite, sélectionner partout $\mathbf{x}-\mathbf{x}_0$ parallèle à la direction locale de la ligne de courant passant par le point \mathbf{x} peut entraîner certains problèmes. En effet, trouver $C(\mathbf{x}_0)=0,5$ tel que $\mathbf{x}-\mathbf{x}_0$ est parallèle à $\mathbf{V}(\mathbf{x})$ n'a pas de solution dans les régions où l'interface est parallèle à \mathbf{V} . De plus à proximité de ces régions les solutions \mathbf{x}_0 est \mathbf{x}'_0 correspondant à deux points voisins \mathbf{x} et \mathbf{x}' peuvent se retrouver fortement séparées à cause des importantes différences entre $\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{x}_0)$ et $\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{x}'_0)$. Plutôt que d'améliorer le résultat global, ce comportement peut dans certains cas dégrader de façon dramatique le transport des fronts, comme l'illustre la figure 2.17.

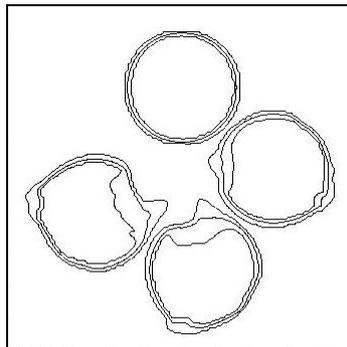


Figure 2.17: Rotation solide d'un disque avec \mathbf{x}_0 déterminé en utilisant les directions des lignes de courant. Le disque est initialement en haut. La rotation $U=y$ $V=-x$ se fait dans le sens horaire. Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$. Maillage 100×100 .

Une dernière possibilité consiste à choisir \mathbf{x}_0 tel que $C(\mathbf{x}_0)=0,5$ et $\mathbf{x}-\mathbf{x}_0$ est parallèle à la $i^{\text{ème}}$ direction du maillage correspondant à l'une des directions d'advection du taux de présence (1.24). Ce choix est clairement consistant avec l'algorithme de transport et se révèle être efficace dans la plupart des situations. Cependant dans les cas présentant des régions où la courbure des fronts est grande et où les directions du maillage ne sont pas alignées avec l'interface, ce choix peut se révéler inopérant (voir le cas test de la figure 2.25).

Au regard des considérations évoquées précédemment, nous décidons d'adopter une stratégie mixte qui permet de tirer le meilleur parti des deux derniers candidats. Pour ce faire, nous calculons en tout point de Ω les produits scalaires $|\cos\alpha| = |(\nabla C / \|\nabla C\|) \cdot \mathbf{e}_i|$ et $|\cos\beta| = |(\nabla C / \|\nabla C\|) \cdot (\mathbf{V} / \|\mathbf{V}\|)|$ où \mathbf{e}_i est

la normale unitaire correspondant à la $i^{\text{ème}}$ direction du maillage et \mathbf{V} la vitesse locale. Suivant la valeur relative de $|\cos\alpha|$ et $|\cos\beta|$, nous cherchons \mathbf{x}_0 sur la ligne du maillage passant par \mathbf{x} et parallèle à \mathbf{e}_i ou sur la ligne de courant passant par \mathbf{x} . Notons que dans certains cas particuliers, notamment quand les lignes de courant et la $i^{\text{ème}}$ ligne du maillage sont toutes les deux parallèles au front, il est possible qu'aucune des deux familles de lignes ne croisent la courbe $C=0,5$: nous gardons alors simplement $\tilde{\mathbf{V}}=\mathbf{V}$.

En pratique la procédure pour sélectionner \mathbf{x}_0 comprend différentes étapes. Dans un premier temps, nous évaluons $|\cos\alpha(\mathbf{x})|$ et $|\cos\beta(\mathbf{x})|$, et détectons si $C(\mathbf{x})$ est inférieur ou supérieur à 0,5. Dans un second temps nous examinons les valeurs de C des deux nœuds voisins de \mathbf{x} qui sont soit sur la même $i^{\text{ème}}$ ligne du maillage (si $|\cos\alpha(\mathbf{x})| \geq |\cos\beta(\mathbf{x})|$), soit les nœuds les plus proches de la droite parallèle à $\mathbf{V}(\mathbf{x})$ issue de \mathbf{x} (si $|\cos\alpha(\mathbf{x})| < |\cos\beta(\mathbf{x})|$). Supposons que $C(\mathbf{x}) < 0,5$. Si aucun des nœuds voisins sélectionnés précédemment ne porte une valeur de C plus grande que $C(\mathbf{x})$, nous gardons simplement $\tilde{\mathbf{V}}=\mathbf{V}$. Si au moins un des nœuds voisins porte une valeur de C supérieure à $C(\mathbf{x})$, nous désignons par \mathbf{x}_1 le point correspondant (dans le cas où les deux points voisins portent une valeur de C supérieure à $C(\mathbf{x})$, nous choisissons pour \mathbf{x}_1 celui correspondant à la plus grande valeur de C) et nous recommençons la procédure avec \mathbf{x}_1 au lieu de \mathbf{x} . Cette procédure est répétée n fois jusqu'à ce que nous trouvions $C(\mathbf{x}_n) > 0,5$. Enfin, comme le maillage utilisé est à variables décalées, il y a nécessairement un nœud de vitesse entre \mathbf{x}_{n-1} et \mathbf{x}_n et c'est ce point que nous définissons comme \mathbf{x}_0 . La procédure se déroule de façon symétrique dans le cas où $C(\mathbf{x}) > 0,5$.

Conclusion

Modifier le champ de vitesse dans la zone de transition est tout aussi arbitraire que modifier la définition de l'interface. Dans les deux cas on cherche à résoudre un problème d'origine numérique. L'objectif en modifiant la vitesse dans la région Ω est de rendre constante la vitesse d'une interface qui n'est pas définie en une position unique mais sur une région de l'espace. Il faut souligner que cette modification est locale, c'est à dire que tous les points situés le long de l'interface n'ont pas la même vitesse. Ceci reviendrait à procéder à des translations uniformes qui empêcheraient les fronts d'évoluer correctement. De plus, la vitesse modifiée $\tilde{\mathbf{V}}$ n'est utilisée que pour le transport de C , et la vitesse réelle \mathbf{V} est utilisée pour toutes les autres étapes de la résolution des équations du modèle. Il est clair que la masse de chaque fluide n'est pas conservée pendant l'application de (2.8). Cependant l'erreur correspondante s'ajoute à l'erreur issue de la résolution en étapes unidimensionnelles de l'équation de transport de C (voir la section précédente). La conservation de la masse globale est ensuite restaurée grâce à (2.7). Le temps de calcul utilisé par la procédure de modification de la vitesse est inférieur à 2% du temps de calcul total pour toutes les simulations effectuées. De plus $(\tilde{\mathbf{V}} - \mathbf{V})$ tend vers zéro quand le pas d'espace tend vers zéro car $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ tend vers zéro pour $\mathbf{x} \in \Omega$. Cette méthode est applicable à tous les schémas rencontrant le problème d'érosion de la raideur des fronts, voire à tous les schémas dont la quantité à transporter est raide et s'altère au cours du temps à cause de l'étirement. Des exemples de transport de fronts avec le schéma amélioré sont présentés dans la partie II de ce chapitre.

Pour résumer, l'algorithme de transport du taux de présence procède de la façon suivante :

1. Suivant chaque direction de l'espace (l'ordre des directions change à chaque pas de temps par permutation circulaire) :
 - (a) Détection de la région de transition Ω ,
 - (b) Annulation de l'étirement en remplaçant \mathbf{V} par $\tilde{\mathbf{V}}$ déterminé via (2.8),
 - (c) Avancement de C par résolution de l'équation unidimensionnelle (2.4) en utilisant $\tilde{\mathbf{V}}$ (les flux $\tilde{\mathbf{V}} \cdot \nabla C$ sont calculés avec le schéma de Zalesak),
2. Contrôle des erreurs de masse par le calcul de \tilde{C} via (2.7).

II. Tests de l'algorithme de transport du taux de présence

Cette partie présente une série de tests mettant en évidence les qualités et les limites de la technique de transport décrite précédemment. Pour tous ces tests, le champ de vitesse est imposé. Nous ne résolvons donc pas le bilan de quantité de mouvement, seule l'équation hyperbolique de transport du taux de présence est résolue. Le terme « schéma non modifié » désigne le schéma FCT développé par *Benkenida 1999* (utilisant \mathbf{V} et C) et le terme « schéma modifié » désigne le schéma FCT modifié (utilisant $\tilde{\mathbf{V}}$ et \tilde{C} calculés via les procédures 2.8 et 2.7 respectivement).

1) Translation

Soit une boîte cubique de 60 mailles de côté, de longueur 1 unité, dans laquelle nous plaçons un cube de 20 mailles de côté ($C=1$). Soit le champ de vitesse uniforme $U=V=W=1$. La figure 2.18 représente le taux de présence à quatre instants successifs, la première image correspondant à la condition initiale.

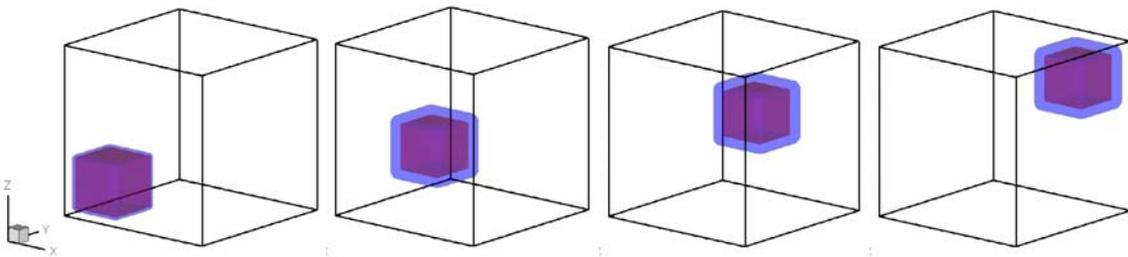


Figure 2.18: Translation d'un cube à la vitesse $U=V=W=1$. Iso-surfaces $C=0,01-0,99$.

Les iso-contours sont plus écartés sur les trois dernières images qu'au départ mais cet écartement reste constant. L'espace entre les deux iso-contours extrêmes est d'environ trois cellules de calcul.

Remarque :

Le schéma FCT est-il efficace pour transporter toutes les distributions de fraction volumique ?

Pour répondre à la question, considérons sur la figure 2.19 la translation unidimensionnelle d'une distribution gaussienne de C (les symboles correspondent à la solution numérique). La forme calculée est peu satisfaisante, elle correspond à une série de marches d'escalier de trois à quatre cellules de large environ. Le schéma FCT n'est donc pas adapté pour transporter toutes les

distributions. On pourrait s'étonner de la piètre qualité du transport de la distribution gaussienne. Cependant les schémas de type FCT ont été initialement conçus pour transporter correctement les fronts raides, ils sont d'ailleurs qualifiés de schémas « raidisseurs de fronts ». Pour transporter des fronts à pente modérée, de nombreux schémas existent et sont bien mieux adaptés comme par exemple les schémas ENO-WENO (*Jiang et al. 2000*).

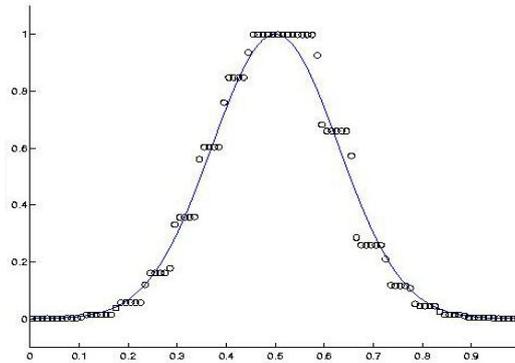


Figure 2.19: Transport d'une distribution gaussienne de taux de présence à la vitesse $U=1$. Le trait continu représente la solution exacte, les symboles la solution numérique après 1000 itérations (les conditions aux limites sont périodiques).

2) Rotation

Nous considérons la même boîte mais cette fois nous plaçons une boule de 20 mailles de diamètre dans laquelle $C=1$. Soit le champ de vitesse $U=z$, $V=0$, $W=-x$. La boule fait un tour complet dans le sens horaire et ce, dans un plan quasi-parallèle à la feuille (de normale y).

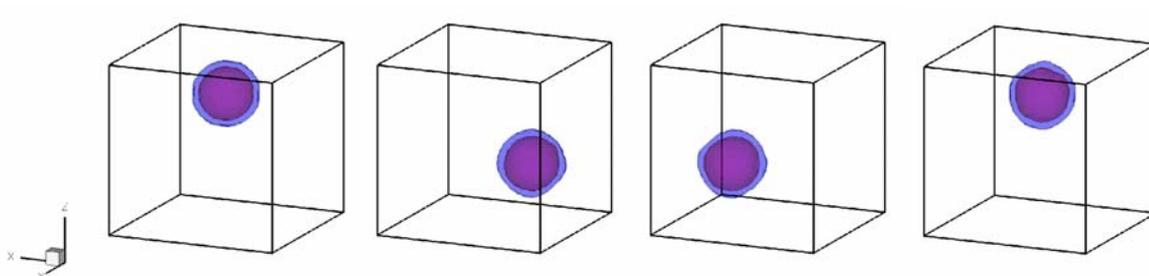


Figure 2.20: Rotation d'une boule à la vitesse $U=z$; $V=0$; $W=-x$. Iso-surfaces $C=0,01-0,99$.

Nous pouvons observer sur la figure 2.20 un écartement des iso-contours dès la condition initiale. En effet lors de l'initialisation, une interpolation est réalisée pour éviter d'obtenir une sphère composée de nombreuses « marches d'escalier ». Le suivi d'interface se fait sans problème, l'épaisseur de la zone de transition reste inférieure à trois cellules de calcul.

3) *Étirement*

Transport d'une marche

Considérons le cas monodimensionnel d'une distribution du taux de présence de type marche d'escalier (soit la moitié d'un créneau). La marche est initialement située à $x=0,1$. La longueur du domaine est de 2. Le champ de vitesse est $U(x)=\exp[-5\exp(-25x^2)]$. La vitesse est choisie de façon à créer une région de fort étirement suivi d'une région à étirement nul ; ce champ de vitesse et l'étirement adimensionnel correspondant sont tracés sur la figure 2.21.

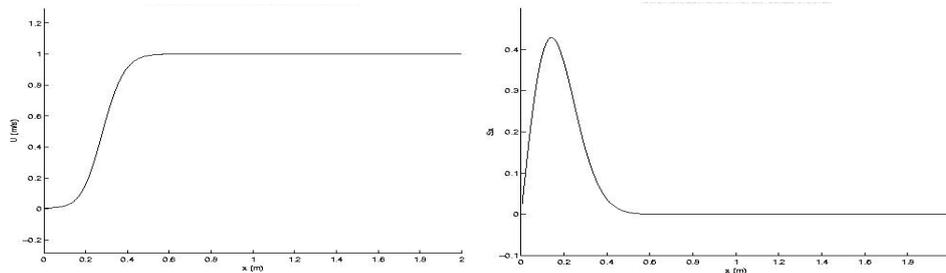


Figure 2.21: A gauche : Vitesse imposée. A droite : Etirement adimensionnel imposé.

Le pas d'espace vaut 1/100, le pas de temps correspond à une condition CFL de 1 ; une condition de sortie est utilisée aux extrémités du domaine. La figure 2.22 présente (a) les résultats avec le schéma non modifié (b) les résultats avec le schéma modifié.

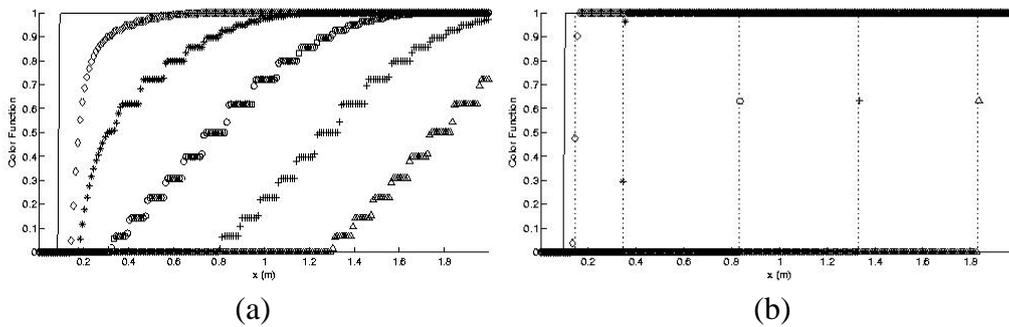


Figure 2.22: Transport d'une marche d'escalier dans un écoulement d'étirement. (a) Calcul avec le schéma FCT non modifié. (b) Calcul avec le schéma FCT modifié. (—) Condition initiale. (...)Position théorique.

Sans les modifications, le front s'étale progressivement au passage de la zone à fort étirement. Avec les modifications, le front conserve sa raideur, et l'écart de position entre les solutions numérique et théorique reste inférieur une cellule de calcul. Notons dans le cas (b) que l'interface s'étale sur trois cellules de calcul au passage de la région où l'étirement est le plus fort et qu'elle se raidit à nouveau dans la région où la vitesse redevient uniforme. Il faut noter qu'ici, la technique de conservation de la masse est désactivée car le champ de vitesse choisi n'est pas à divergence nulle.

Transport d'un rectangle dans un écoulement horizontal

Nous considérons maintenant un domaine de longueur 2 et de largeur 0,7 suivant la direction y . Le champ de vitesse est $U(x,y)=\exp[-5\exp(-25x^2)]$ et $V(x,y)=0$. Nous choisissons comme condition initiale un front avec un « coin » ($C=0$ en amont du front, $C=1$ en aval) pour tester la capacité du schéma modifié à transporter les fronts présentant des singularités de courbure. La figure 2.23a présente la position initiale du front ainsi que le champ de vitesse imposé. La figure 2.23b montre la position finale du front issu du calcul avec le schéma non modifié (les lignes d'iso-contours correspondent à $C=0,01$ et $C=0,99$). La figure 2.23c correspond au même calcul mais avec le schéma modifié. Enfin, la figure 2.23d représente la position théorique du front au même instant.

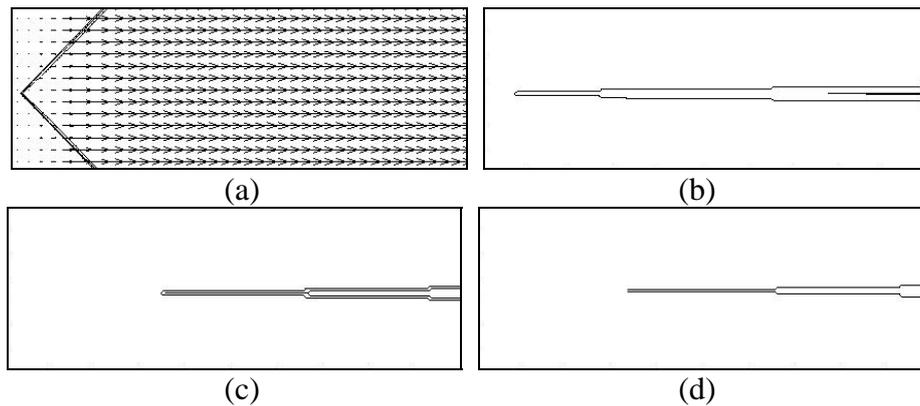


Figure 2.23: Transport d'un "coin" dans un écoulement élongationnel.
 (a) Condition initiale. (b) Calcul avec le schéma non modifié.
 (c) Calcul avec le schéma modifié. (d) Position théorique du front.

Le « coin » s'est allongé et son angle d'ouverture a diminué à cause des différences de vitesse entre les points du front proches de la singularité de courbure et ceux situés plus loin de part et d'autre de celle-ci et qui sont transportés plus rapidement. L'étalement du front dans le cas de la figure 2.23b est de l'ordre de la taille du domaine (notamment le long de l'axe de symétrie), tandis que dans le cas de la figure 2.23c il reste inférieur à trois cellules de calcul. De plus, on peut noter le bon accord entre la position du front calculé (cas c) et celle du front théorique (cas d). Bien que la vitesse à l'interface soit rendue constante localement, elle ne l'est pas globalement. C'est pourquoi le front peut évoluer librement, tout en conservant une épaisseur faible. Notons cependant que ce cas est un peu particulier car les lignes de courant sont rigoureusement parallèles à la direction x du maillage : la direction de modification de la vitesse est en quelque sorte imposée. Afin de tester l'aptitude de la nouvelle méthode à transporter des fronts pour des orientations quelconques de la vitesse par rapport au maillage, le test suivant examine le transport d'un front présentant une région de forte courbure dans un champ d'éirement pur incliné.

Transport d'un rectangle dans un écoulement diagonal

Nous considérons maintenant un champ d'éirement dont les directions principales d'éirement forment un angle de 45 degrés avec les directions des lignes du maillage : $U(x,y)=y-y_H$ et $V(x,y)=$

$x-x_H$ (avec $x_H=y_H=0,77$ dans l'exemple choisi). Nous plaçons un rectangle incliné lui aussi à 45 degrés par rapport au maillage (voir figure 2.24). La figure 2.25 montre comment le schéma original se comporte dans cette situation. Le front s'étale sur plusieurs cellules de calcul dans la région du coin proche du point hyperbolique $x=x_H, y=y_H$. Si \tilde{V} était calculé en utilisant les lignes du maillage on obtiendrait exactement les mêmes résultats car U (respectivement V) est constante le long des lignes du maillages $y=constante$ (respectivement $x=constante$). Modifier \tilde{V} en autorisant la détermination de \mathbf{x}_0 le long des lignes de courant permet de conserver la raideur du front comme l'illustre la figure 2.26. On peut remarquer qu'un étalement subsiste au niveau des coins. La raison provient de la très forte courbure au niveau du coin qui, ajoutée au fait que les deux lignes $C=0,5$ ne sont plus séparées que par une distance de l'ordre de trois cellules de calcul (correspondant à l'épaisseur numérique habituelle de l'interface), empêche la procédure de correction d'annuler complètement l'étalement dans la région de transition.

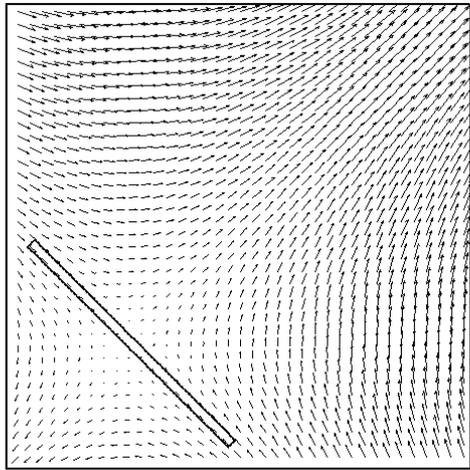


Figure 2.24: Condition initiale : taux de présence et champ de vitesse.

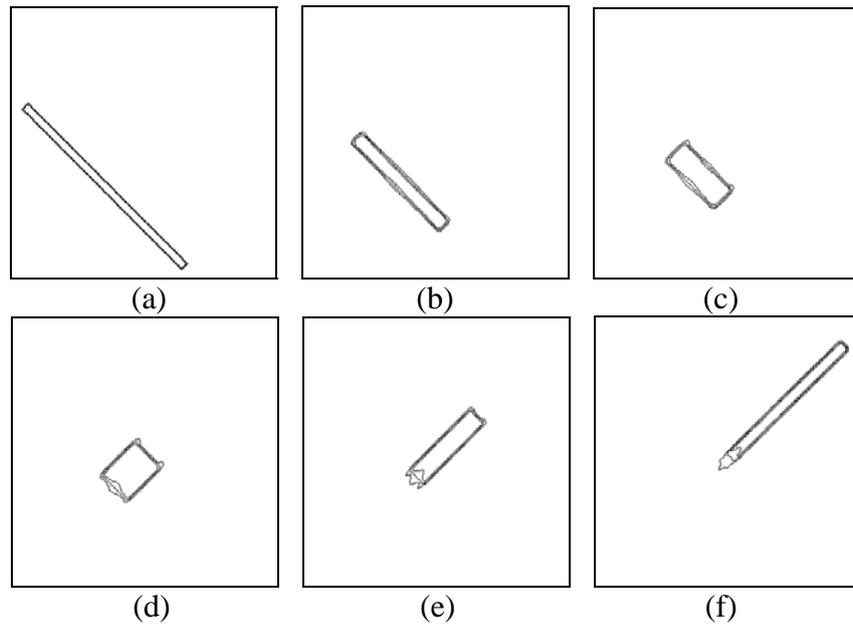


Figure 2.25: Transport d'un rectangle dans un écoulement d'étirement pur incliné à 45° $U(x,y)=y-y_H$; $V(x,y)=x-x_H$; $x_H=y_H=0,77$. Ici $\tilde{\mathbf{V}}=\mathbf{V}$. (iso-contours $C=0.01-0,5-0.99$; maillage 300×300).

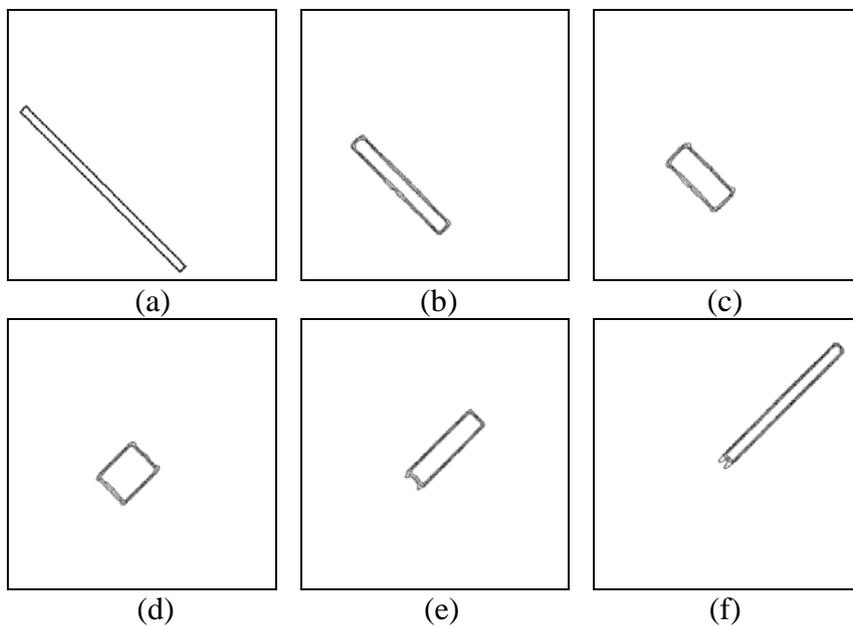


Figure 2.26: Même situation que sur la figure 2.24 mais ici $\tilde{\mathbf{V}}$ est calculé via (2.8).

Effet d'un champ de déformation pure 2D

Soit une distribution initiale du taux de présence caractérisée par la présence d'un rectangle de dimension 10×60 mailles au sein du domaine de calcul tel que $C=1$ à l'intérieur et 0 à l'extérieur, dans un domaine de dimensions 1×1 . Le champ de vitesse est $U(x,y)=x$, et $V(x,y)=-y$. Le pas d'espace est fixé à $1/100$. La figure 2.27a représente la position initiale du rectangle et le champ de vitesse imposé. Les figures 2.27b à 2.27d représentent respectivement la position théorique de ce rectangle à un instant donné, le taux de présence calculé avec le schéma non modifié et celui obtenu avec le schéma modifié. Ici la procédure de conservation de la masse est activée.

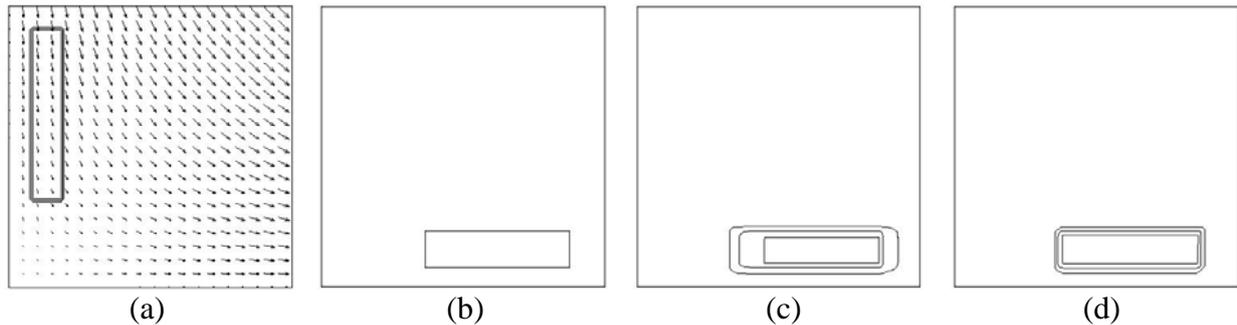


Figure 2.27: Transport d'un rectangle dans un champ d'étirement pur. (a) Condition initiale. (b) Position théorique. (c) Calcul avec le schéma non modifié. (d) Calcul avec le schéma modifié.

Nous retrouvons sur la figure 2.27c la faiblesse principale de la méthode de suivi de front sans reconstruction : les fronts s'étalent sous l'effet de l'étirement. Avec les améliorations apportées, la raideur des fronts est bien préservée, et l'épaisseur de l'interface reste inférieure à 3 cellules de calcul. Pour évaluer la qualité de la conservation de la masse des différents schémas, l'écart de masse relatif Δm (calculé via l'équation 2.6) est comparé. Pour le schéma non modifié $\Delta m=0,4\%$ à l'instant représenté sur la figure 2.27 tandis que pour le schéma modifié $\Delta m=0,03\%$. Cette dernière valeur est comme prévue inférieure au critère $\Delta m_C=0,1\%$ défini pour déclencher la procédure de restauration de la masse (2.7).

4) Rotation et déformation

Considérons enfin une distribution initiale de C caractérisée par la présence d'un disque de 40 mailles de diamètre au sein du domaine de calcul tel que le $C=1$ à l'intérieur et $C=0$ à l'extérieur. Le domaine a pour dimensions $1,3 \times 1,3$, et le champ de vitesse est $U(x,y)=\sin(x).\cos(y)$, et $V(x,y)=-\cos(x).\sin(y)$ sur le domaine $[0,\pi] \times [0,\pi]$. Le pas d'espace est de $1/100$. Dans un premier temps nous réalisons 1000 pas de temps avec comme champ de vitesse (U,V) , puis nous arrêtons la simulation : les résultats sont recensés dans la deuxième colonne de la figure 2.28 (cas b-e-h). Nous inversons ensuite le sens de rotation de l'écoulement en imposant comme nouveau champ de vitesse $(-U,-V)$ et nous simulons à nouveau 1000 pas de temps : les résultats sont recensés dans la troisième colonne (cas c-f-i). La première ligne correspond au résultat « lagrangien » où l'on a suivi des

marqueurs initialement placés uniformément sur l'interface. La seconde et la troisième lignes correspondent respectivement au calcul avec le schéma non modifié et le schéma modifié.

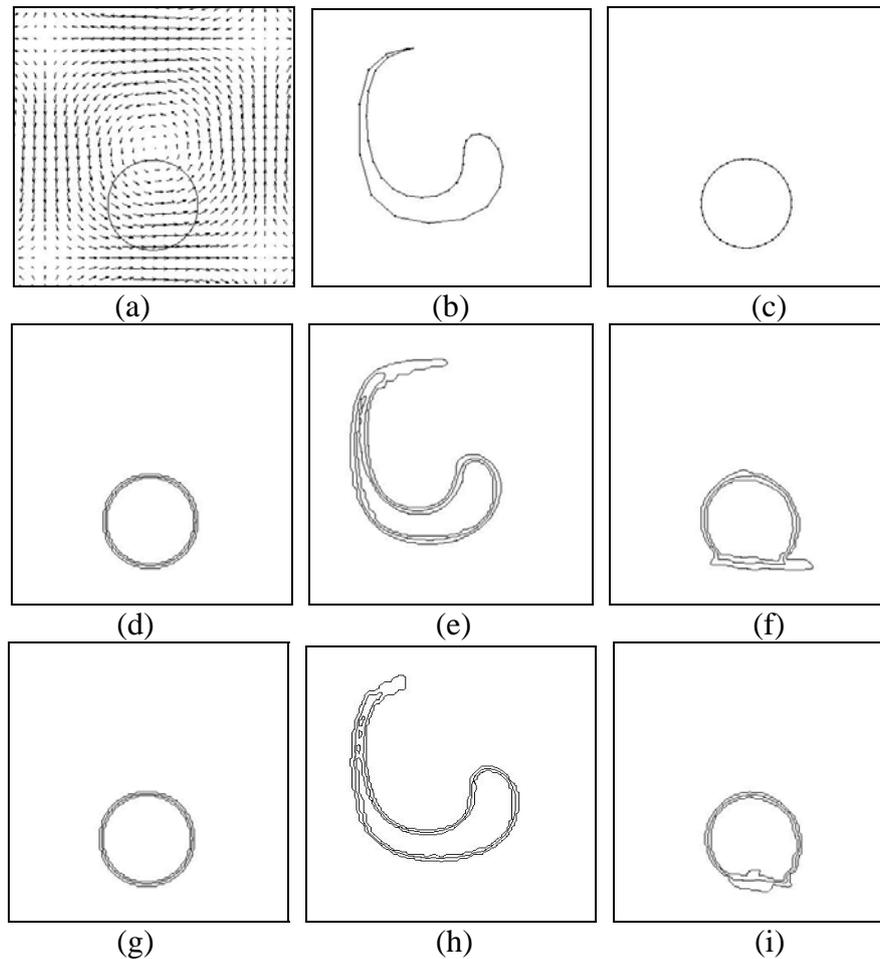


Figure 2.28: Evolution d'un disque transporté par un tourbillon en présence d'étirement.
 Par colonne : (gauche) Configuration initiale. (milieu) Sens direct. (droite) Sens inverse.
 Par ligne : (haut) Marqueurs. (milieu) Schéma non modifié. (bas) Schéma modifié.
 (Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$)

On observe pour les cas (e) et (h) la formation d'un filament à l'arrière de la structure. Lorsque la largeur de ce filament devient de l'ordre de quelques mailles (typiquement 3), les iso-contours de C s'écartent fortement, signe que la solution subit une importante diffusion. Cette zone correspond à l'endroit où la forme du front est singulière. Pour les cas (f) et (i), la forme finale que nous obtenons avec et sans modification du schéma de transport n'est pas parfaitement circulaire, ce qui indique que l'étalement que le front a subi pendant la première étape a provoqué une évolution irréversible. On reconnaît ici la limitation rencontrée dans le cas du coin dans l'écoulement incliné. En ce qui concerne la conservation de la masse, les écarts relatifs correspondant aux cas (e), (f), (h) et (i) sont résumés dans le tableau 2.2 ci-dessous.

Ecart relatif en masse Δm	Sens direct	Sens inverse
Schéma non modifié	Cas (e) $\Delta m=1,5\%$	Cas (f) $\Delta m=3\%$
Schéma modifié	Cas (h) $\Delta m=0,03\%$	Cas (i) $\Delta m=0,06\%$

Tableau 2.2: Conservation de la masse.

L'écart relatif de masse n'est plus négligeable dans le cas du schéma non modifié. En revanche, l'écart relatif reste inférieur à $\Delta m_C=0,1\%$ dans le cas du schéma modifié : la masse est conservée même si ce n'est plus de façon locale. Le cas équivalent en trois dimensions (*LeVeque 1996, Enright et al. 2002*) a été traité mais n'est pas présenté car les observations et les conclusions sont les mêmes que dans le cas bidimensionnel.

Pour compléter l'étude, nous présentons sur la figure 2.29 le résultat du transport d'un disque dans un écoulement tournant pour différentes résolutions spatiales. La fonction de courant de cet écoulement est $\psi = \pi^{-1} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y)$ (*Rider & Kothe 1998*). La longueur du domaine carré est 1. On place initialement un disque de rayon $R=0,15$ en $x=0,5$ et $y=0,75$ ($C=1$ à l'intérieur). Le disque est transporté jusqu'au temps $T=1$. Puis le sens de l'écoulement est inversé et le disque revient à sa position initiale au temps $t=2T$. Si le schéma est idéal, les positions initiale et finale du disque coïncident. Les iso-contours $C=0,01, 0,5$ et $0,99$ obtenus aux temps $t=0, T$ et $2T$ sont représentés sur la figure 2.29 pour quatre résolutions spatiales $\Delta x=1/30, 1/60, 1/120$ et $1/240$. Sur les deux maillages grossiers la solution à $t=2T$ est très éloignée de la solution initiale. Pour la résolution $\Delta x=1/30$, l'iso-contour $C=0,99$ est totalement absent au temps $t=T$ et $2T$, tandis que pour la résolution $\Delta x=1/60$ les iso-contours sont très éloignés les uns des autres. Les résultats sont nettement meilleurs sur les deux autres maillages. On observe tout de même un écartement des iso-contours $C=0,01$ et $C=0,5$ à $t=T$ quand le filament créé par la déformation de l'écoulement atteint une épaisseur inférieure à trois cellules de calcul. On calcule une estimation de l'erreur E_1 en norme L^1 du schéma de transport, définie par $E_1 = \sum_{i,j} |C_{i,j} - C_{i,j}^0| / \sum_{i,j} C_{i,j}^0$, où $C_{i,j}^0$ désigne le taux de présence à $t=0$ au nœud (i,j) . E_1 mesure le pourcentage de l'aire du disque qui n'est pas correctement redistribuée à $t=2T$. On calcule une autre estimation de l'erreur numérique $E_2 = \sum_{i,j} |C_{i,j} - C_{i,j}^0| / 2\pi R \Delta x$

qui compare l'épaisseur moyenne de la couronne dans laquelle les taux de présence initial et final diffèrent, au pas d'espace Δx . Les résultats sont reportés dans le tableau 2.3. L'ordre de convergence est d'environ 1,4. Ces résultats sont comparables à ceux de *Olsson & Kreiss 2005* qui utilisent une méthode de type Level Set.

Les différents cas-tests présentés mettent en évidence les qualités de la nouvelle technique de transport des fronts dans des écoulements avec étirement : la raideur des fronts et la masse des différentes phases sont conservées. Notons cependant que la diffusion des fronts subsiste lorsqu'une singularité de courbure du front se trouve dans une zone d'étirement et que deux fronts se retrouvent séparés d'une distance typiquement inférieure à trois cellules de calcul.

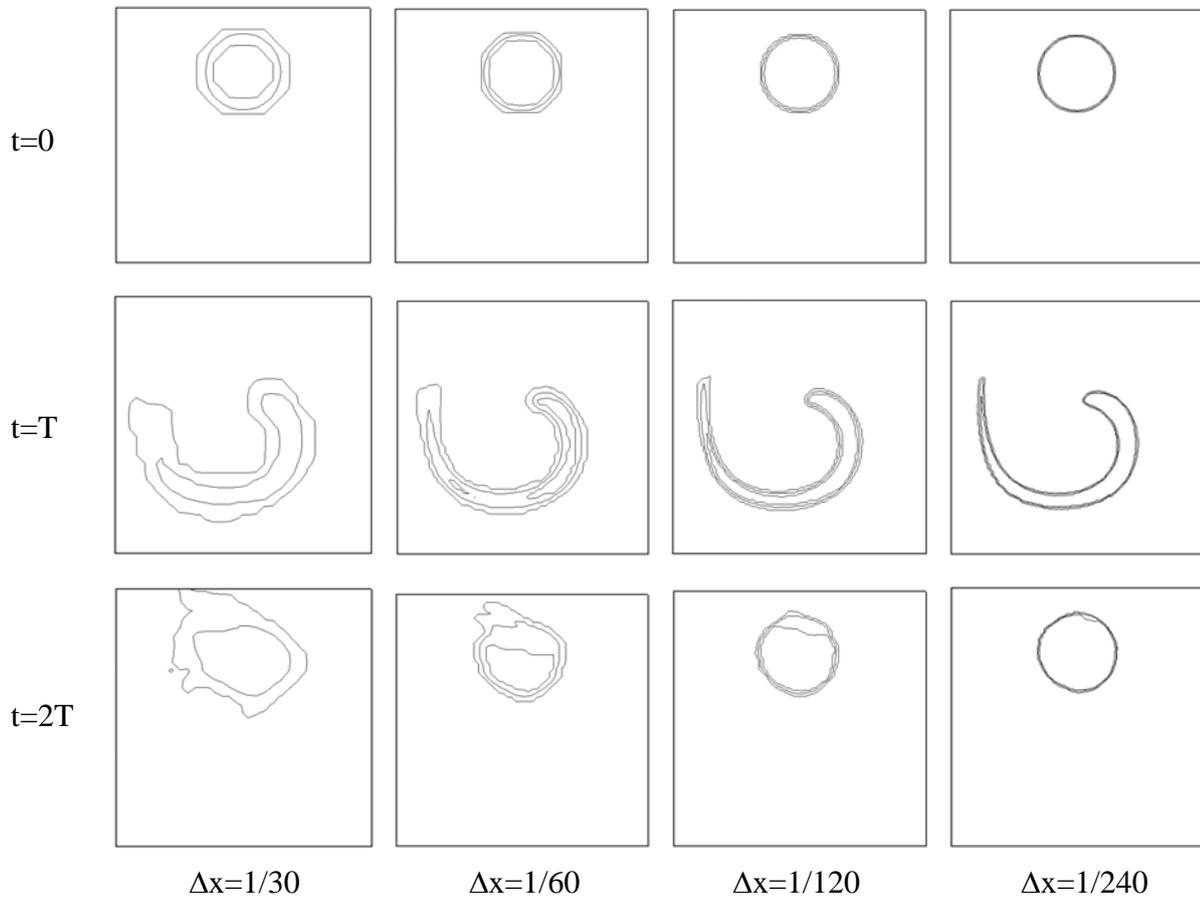


Figure 2.29: Evolution d'un disque transporté par un tourbillon avec étirement pour différentes résolutions spatiales. $T=1$; Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$.

Résolution spatiale	E_1	Ordre	E_2
30^2	0.5205	—	1.171
60^2	0.1630	1.67	0.734
120^2	0.0737	1.15	0.663
240^2	0.0291	1.34	0.524

Tableau 2.3: Evolution de l'erreur en fonction de la résolution spatiale.

Retour à l'exemple de départ

Pour tester le comportement de la technique de transport dans un écoulement réel, revenons à l'exemple de la montée d'une bulle dans un liquide initialement au repos présenté au début de ce chapitre. La figure 2.30 compare l'évolution de la forme et de la masse de la bulle dans les cas où le transport de C est traité par le schéma original (utilisant \mathbf{V} et C) et par le schéma modifié (utilisant $\tilde{\mathbf{V}}$ et \tilde{C}). Les fronts restent raides dans le cas (b) et la bulle atteint un état stationnaire. De plus, la variation de masse de la bulle reste inférieure à la condition imposée (figure de droite). La figure 2.31 résume les différentes améliorations apportées à la technique de capture de l'interface.

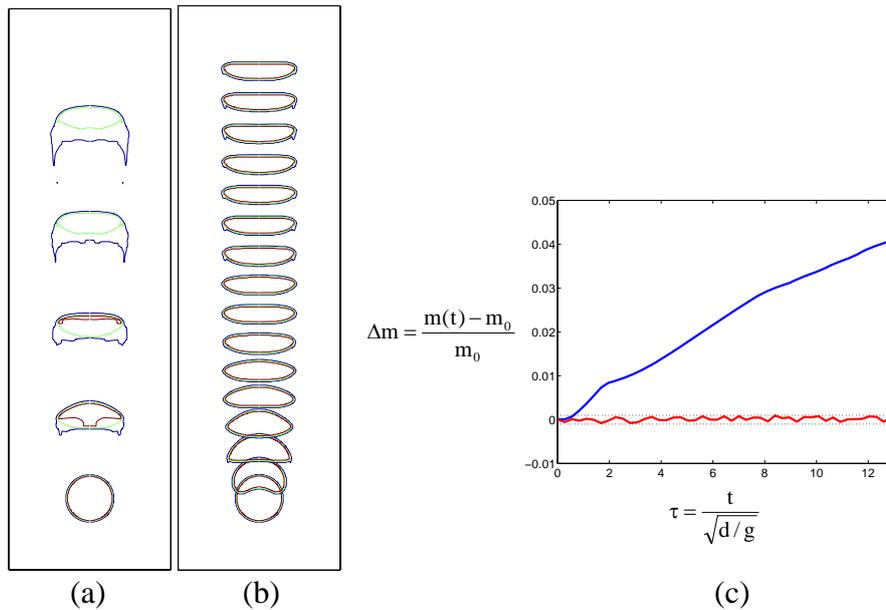


Figure 2.30: Montée d'une bulle (a) avec le schéma non modifié (b) avec le schéma modifié. (c) Evolution de la masse de la bulle ; la courbe bleue correspond au cas (a), la courbe rouge au cas (b), et les pointilles à $\Delta m_C = 0,1 \%$. (Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$).

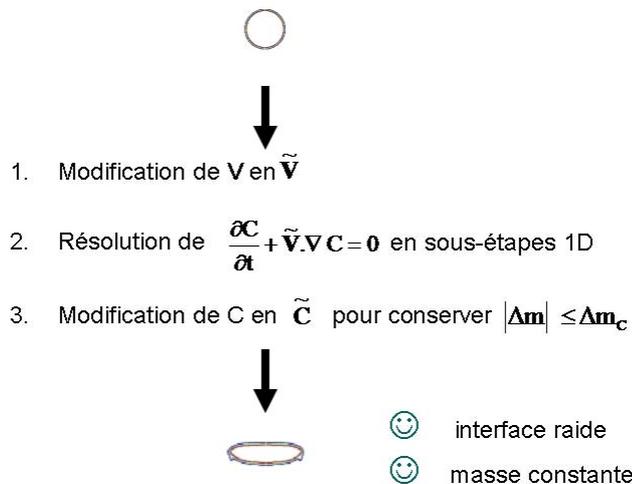


Figure 2.31: Améliorations apportées au transport de taux de présence.

Chapitre 3

Validation de l'outil numérique

Ce chapitre a pour but de présenter différents tests du code de calcul complet basé sur la méthode de transport présentée au Chapitre 2. Il est divisé en trois parties correspondant à des phénomènes dont l'origine physique est différente. Dans la première, seuls la gravité et la capillarité jouent un rôle tandis que dans la seconde partie ce sont les effets visqueux qui prédominent. À ce titre, cette deuxième partie permettra de montrer l'influence du modèle de tenseur des contraintes visqueuses (voir Chapitre 1 – Partie II – Section 1) sur la reproduction de la physique des phénomènes. Enfin, nous validons l'outil sur des configurations où tous les effets participent, comme c'est le cas dans les écoulements à bulles.

I. Phénomènes capillo-gravitaires

1) *Rupture d'un barrage*

Considérons la chute bidimensionnelle d'une colonne d'eau dans de l'air sous l'effet de la gravité. La colonne a pour dimensions 2m de hauteur et 1m de large, sa partie gauche est retenue par un mur, la vitesse est initialement nulle partout (voir figure 3.1). Les paramètres sont résumés dans le tableau suivant :

Masse volumique du liquide ρ_1	1000 kg/m ³
Masse volumique du gaz ρ_2	1,3 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_1	1.10 ⁻³ kg/(m.s)
Viscosité dynamique du gaz μ_2	2.10 ⁻⁵ kg/(m.s)
Tension de surface σ	0 N/m

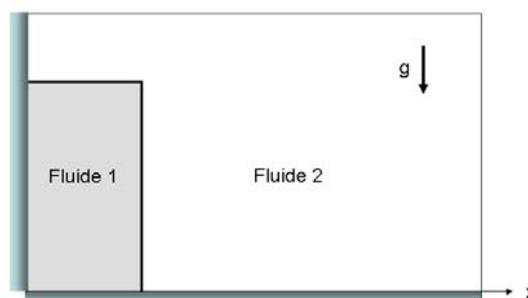


Figure 3.1: Rupture de barrage.

À $t > 0$, la gravité agit sur la colonne d'eau et celle-ci s'effondre en s'écoulant du côté opposé au mur. La position du front de la colonne d'eau est enregistrée et comparée aux expériences de *Martin & Noyce 1953*. Les résultats sont tracés sur la figure 3.2 pour un maillage 100×50 ($\Delta x = \Delta y = 0,05m$), les conditions aux limites étant du type paroi pour les frontières gauche et inférieure, et du type glissement pour les frontières droite et supérieure. Le trait continu correspond aux résultats expérimentaux (*Martin & Noyce 1953*) tandis que les barres correspondent à la position des iso-

contours « extrêmes » $C=0,01-0,99$ de la simulation. Le phénomène est correctement reproduit même si l'interface s'étale sur quelques cellules de calcul.

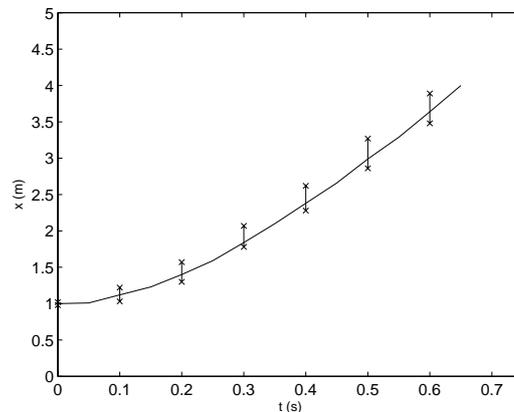


Figure 3.2: Evolution du front de la colonne d'eau.
(—) Résultats expérimentaux de Martin & Noyce 1953. (x-x) Simulation.

2) Onde de gravité-capillarité

Considérons une boîte bidimensionnelle carrée de côté $L=1\text{m}$ contenant deux fluides disposés l'un sur l'autre et séparés par une interface dont la forme est une sinusoïde de longueur d'onde égale à L . Les deux fluides 1 et 2 ont pour densités ρ_1 et ρ_2 , pour viscosités μ_1 et μ_2 . On note σ la tension de surface et g la gravité. La hauteur moyenne est $L/2$ et l'interface est décrite par $y(x)=L/2+a.\cos(kx)$ avec $ak \ll 1$ où $k=2\pi/L$ est le nombre d'onde (voir figure 3.3). Des conditions de symétrie et de périodicité sont respectivement imposées sur les frontières horizontales et verticales. La fréquence des oscillations de l'onde est obtenue en enregistrant la position de l'iso-contour $C=0,5$ et en effectuant une transformation de Fourier du signal.

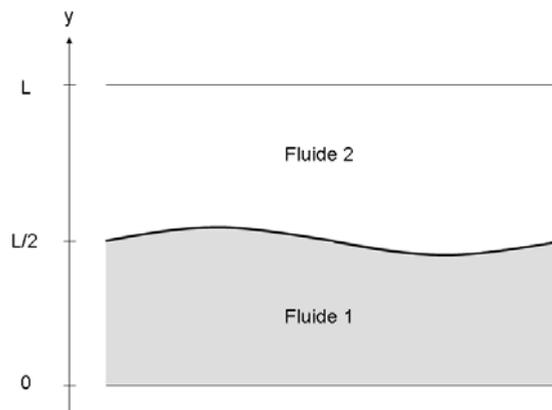


Figure 3.3: Onde de gravité-capillarité.

Pour de faibles amplitudes et des fluides peu visqueux, la fréquence des oscillations de ces ondes est donnée par la relation de dispersion (*Crapper 1984*),

$$f^2 = \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{\rho_1 + \rho_2} [(\rho_1 - \rho_2)gk + \sigma k^3] \tanh\left(\frac{kL}{2}\right) \quad (3.1)$$

Nous considérons par la suite les deux cas particuliers des ondes purement gravitaires et purement capillaires.

Ondes de gravité

Le rapport des densités est fixé à $\rho_1/\rho_2=100$. Les paramètres du problème sont recensés dans le tableau suivant :

Masse volumique du fluide 1 ρ_1	1000 kg/m ³
Masse volumique du fluide 2 ρ_2	10 kg/m ³
Viscosité dynamique du fluide 1 μ_1	1.10 ⁻⁵ kg/(m.s)
Viscosité dynamique du fluide 2 μ_2	1.10 ⁻⁵ kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	0 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Cambrure de l'onde a/L	1.10 ⁻²

Les fréquences obtenues pour différents maillages sont recensées dans le tableau 3.1. On observe une convergence régulière vers la valeur théorique. L'ordre de convergence est proche de 2 pour les maillages grossiers et diminue lorsque le maillage est plus fin. Sur le maillage le plus raffiné l'écart entre la fréquence simulée et théorique est d'environ 0.2%.

Maillage	$\rho_1/\rho_2=100$		
	f (s ⁻¹)	Erreur en %	Ordre
15 × 15	1,1682	5,56	-
30 × 30	1,2212	1,10	2,29
60 × 60	1,2306	0,34	1,71
120 × 120	1,2321	0,21	0,63

Tableau 3.1: Fréquence de l'onde de gravité. La fréquence théorique est 1,237 s⁻¹.

Ondes capillaires

Nous considérons maintenant les ondes purement capillaires (*Lafaurie et al. 1994, Popinet & Zaleski 1999, Gueyffier et al. 1999*). Les paramètres du problème sont recensés dans le tableau suivant :

Masse volumique du fluide 1 ρ_1	1000 kg/m ³
Masse volumique du fluide 2 ρ_2	1000 kg/m ³
Viscosité dynamique du fluide 1 μ_1	1.10 ⁻⁵ kg/(m.s)
Viscosité dynamique du fluide 2 μ_2	1.10 ⁻⁵ kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	7 N/m
Gravité g	0 m/s ²
Cambrure de l'onde a/L	5.10 ⁻⁵

La figure 3.4 montre l'évolution de l'amplitude de l'onde simulée en symboles et de celle prédite par la théorie linéaire en trait continu. Afin de tester la convergence spatiale de la méthode, le test est répété pour différentes résolutions correspondant aux maillages 30², 60², 120², 240². Les résultats sont résumés dans le tableau 3.2. Une convergence proportionnelle à $\Delta x^{1,06}$ est observée. Le phénomène est donc correctement reproduit même si l'interface n'est pas reconstruite et que les amplitudes des oscillations sont très faibles ($a/\Delta y < 0,2 \cdot 10^{-2}$ pour $\Delta y = 1/240$).

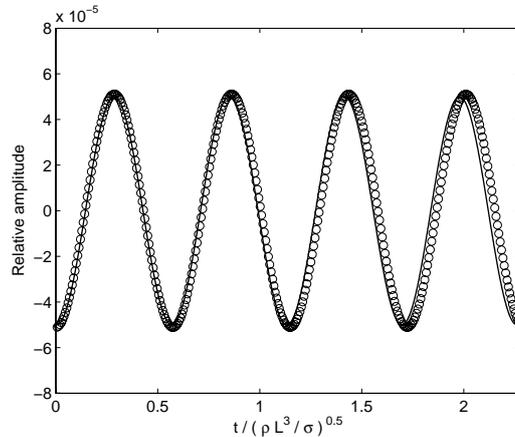


Figure 3.4: Evolution de l'amplitude de l'onde capillaire. Le trait continu correspond à la solution analytique (3.1), les symboles à la simulation pour le maillage 240 × 240.

Δx	f (s ⁻¹)	Erreur relative en %	Ordre
1/30	0,1283	13,49	-
1/60	0,1386	6,54	1,04
1/120	0,1437	3,10	1,08
1/240	0,1461	1,48	1,07

Tableau 3.2: Fréquence de l'onde capillaire. La fréquence théorique est 0,1483 s⁻¹.

3) Oscillations d'une bulle

Cette partie est consacrée à la simulation axisymétrique des oscillations d'une bulle de gaz placée dans un liquide newtonien incompressible, en l'absence de gravité. L'objectif est de comparer les résultats avec les solutions analytiques de Prosperetti 1980. Considérons une bulle de gaz de rayon

équivalent a , de densité ρ_g , de viscosité dynamique μ_g , dans un liquide de densité ρ_l , de viscosité dynamique μ_l . La tension de surface entre les deux phases est σ . Considérons de plus, une petite perturbation notée ε de la forme de la bulle, cette dernière étant initialement sphérique. La figure 3.5 représente les dimensions de la bulle avant et après perturbation de sa forme.

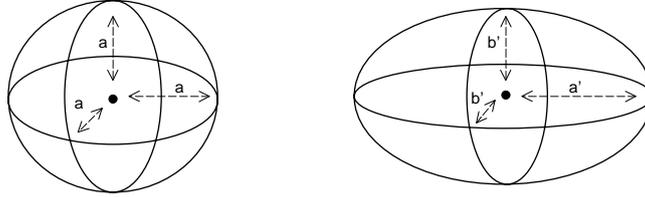


Figure 3.5: Déformation de la bulle.

La perturbation de forme ε est définie par : $\varepsilon = \left| \frac{a' - a}{a} \right|$. La bulle a un volume constant, ce qui implique : $a' = (1 + \varepsilon)a$ et $b' = \frac{a}{\sqrt{1 + \varepsilon}}$. Le problème physique peut être caractérisé par deux paramètres adimensionnels, d'une part la perturbation de forme ε et d'autre part le nombre d'Ohnesorge construit de la manière suivante :

$$\text{Oh} = \frac{\text{temps visqueux}}{\text{temps capillaire}} = \frac{\frac{\rho_l a^2}{\mu_l}}{\sqrt{\frac{\rho_l a^3}{\sigma}}} = \frac{\sqrt{\rho_l a \sigma}}{\mu_l} \quad (3.2)$$

Prosperetti 1980 a considéré le problème des oscillations d'amplitude infinitésimale dans le cas d'un fluide de viscosité quelconque. Il a montré que la fréquence f_n des modes propres est donnée par l'expression :

$$f_n = \frac{1}{2\pi} \sqrt{(n+1)(n-1)(n+2) \frac{\sigma}{\rho_l a^3} - (n+2)^2 (2n+1)^2 \frac{\mu_l^2}{\rho_l^2 a^4}} \quad (3.3)$$

Lorsque les effets visqueux sont négligés, (3.3) se réduit à l'expression trouvée par *Rayleigh 1879* en fluide parfait. Pour pouvoir comparer aux mieux les résultats de nos simulations avec ceux de la théorie linéaire, nous nous plaçons dans la configuration la plus proche possible, c'est-à-dire dans le cas de petites perturbations et dans un domaine peu confiné. Les paramètres sont les suivants : $\varepsilon=0,01$; $\text{Oh}=350$; $L/a=5$. Le domaine de calcul est un cylindre de diamètre $10a$ et de hauteur $10a$ (figure 3.6). Le fait que l'interface évolue librement sur un maillage introduit une contrainte supplémentaire : il faut que le maillage soit suffisamment fin pour pouvoir décrire convenablement les mouvements de l'interface et ces mouvements se font sur une longueur caractéristique d'autant plus petite que la perturbation est faible. En notant l_{osc} la longueur caractérisant l'amplitude des oscillations, on peut estimer l_{osc} en fonction de la perturbation ε et du rayon de la bulle : $l_{\text{osc}}=2\varepsilon a$.

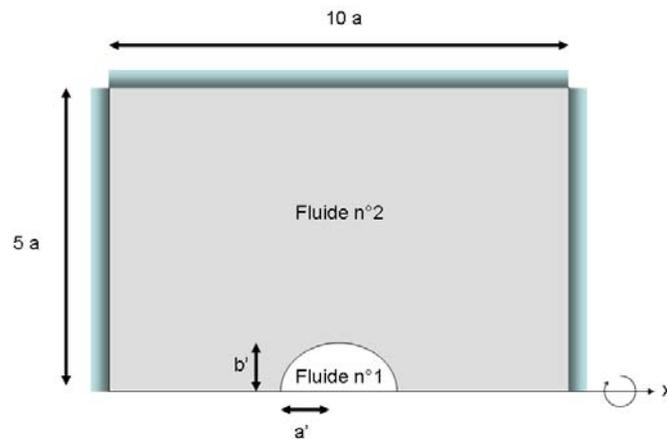


Figure 3.6: Configuration initiale.

Les frontières du domaine de calcul sont des parois sauf pour la frontière en contact avec la bulle qui est un axe de symétrie. Les caractéristiques du problème sont les suivantes :

Masse volumique du liquide ρ_l	135000 kg/m ³
Masse volumique du gaz ρ_g	2700 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	$2,16 \cdot 10^{-2}$ kg/(m.s)
Viscosité dynamique du gaz μ_g	$4,32 \cdot 10^{-4}$ kg/(m.s)
Tension de surface σ	0,0432 N/m
Diamètre de la bulle $d=2a$	0,02 m
Perturbation initiale ε	0,01
Nombre d'Ohnesorge	350
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	50
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	50

Nous simulons l'oscillation de la bulle pendant un temps physique de 25s. Le pas de temps est de $0,25 \cdot 10^{-2}$ s. La taille du maillage cartésien et régulier est 400×200 . Le calcul des deux longueurs caractéristiques l_{osc} et Δx donne $l_{osc} = 2\varepsilon a = 2 \cdot 10^{-4}$ m et $\Delta x = 10a/400 = 2,5 \cdot 10^{-4}$ m. Les deux longueurs sont du même ordre de grandeur. Pour nous placer dans une situation moins délicate, nous pouvons (a) augmenter la taille du maillage mais nous nous retrouvons limités par les ressources de calcul (b) augmenter la taille de la bulle pour un maillage donné mais cela augmente le confinement (c) augmenter l'intensité de la perturbation initiale ε mais nous nous écartons des hypothèses de la théorie linéaire (d) utiliser un maillage non régulier. Nous présentons dans un premier temps les résultats avec le maillage régulier puis ensuite un calcul similaire réalisé avec un maillage irrégulier pour lequel $\Delta x \ll l_{osc}$. La figure 3.7 présente l'évolution du rapport de forme a'/b' ainsi que le spectre en fréquence associé.

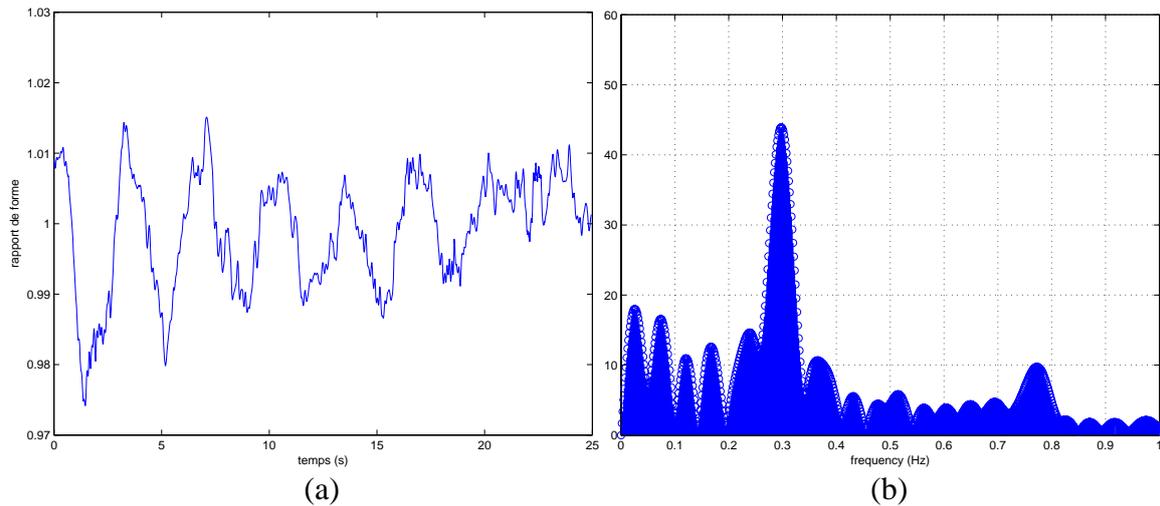


Figure 3.7: (a) Evolution du rapport de forme de la bulle. (b) Spectre en fréquence du signal.

La fréquence f_2 prédite par (3.3) est $f_2=0,3118s^{-1}$. La simulation donne $f_2=0,2985s^{-1}$. L'écart est d'environ 4% entre la fréquence trouvée et celle prédite par *Prosperetti 1980*. Il faut rappeler que dans notre simulation le confinement est faible mais présent. De plus le domaine est cylindrique et non sphérique, ce qui peut avoir une influence sur la fréquence d'oscillation de la bulle. Enfin et surtout la longueur caractéristique de l'oscillation est de l'ordre du pas d'espace. Au regard du spectre de la figure 3.7, aucun pic notable n'est présent aux fréquences f_3 ou f_4 . Ceci est en accord avec le caractère axisymétrique de la simulation et le fait que, compte tenu de la condition initiale, le mode 4 et plus généralement les modes $2n$ ($n>1$) résultent d'interactions non-linéaires et ont donc une intensité très faible pour une telle valeur de ε (*Blanco 1995*). La dynamique de la bulle est donc correctement décrite même pour un maillage « grossier » vis à vis de la longueur caractéristique de l'oscillation. Les oscillations du rapport de forme a'/b' de fréquence f_2 sont reconnaissables sur la figure 3.7a. Cependant elles sont « bruitées » par des oscillations de plus faible amplitude et de très haute fréquence. La cause de ce bruit est liée aux courants parasites présents dans les méthodes eulériennes de suivi d'interface. En effet, une simulation effectuée dans les mêmes conditions mais avec une perturbation initiale $\varepsilon=0,07$ donne une évolution temporelle beaucoup moins bruitée (figure 3.8).

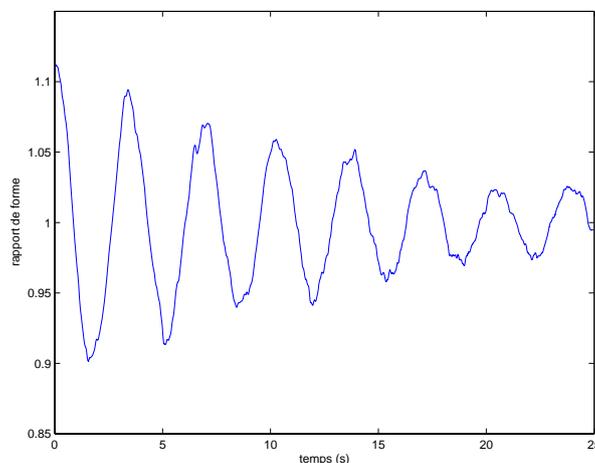


Figure 3.8: Evolution du rapport de forme de la bulle pour $\varepsilon = 0,07$.

Augmenter ε revient d'une part à augmenter la longueur caractéristique l_{osc} : l'interface ne se déplace plus sur une longueur équivalente à une mais à sept cellules de calculs. D'autre part, une perturbation ε plus grande entraîne une vitesse de déplacement de l'interface plus grande au détriment des vitesses dues aux courants parasites qui restent d'intensité constante. Afin de s'affranchir de l'ambiguïté créée par la proximité entre le pas d'espace et la longueur l_{osc} , nous présentons une simulation pour laquelle la taille de la cellule de calcul est beaucoup plus petite que l_{osc} , typiquement $\Delta x \approx l_{osc}/10$. Les limitations informatiques imposent d'utiliser un maillage non régulier permettant de conserver un nombre total de cellules de calcul raisonnable. La figure 3.9 représente le maillage utilisé.

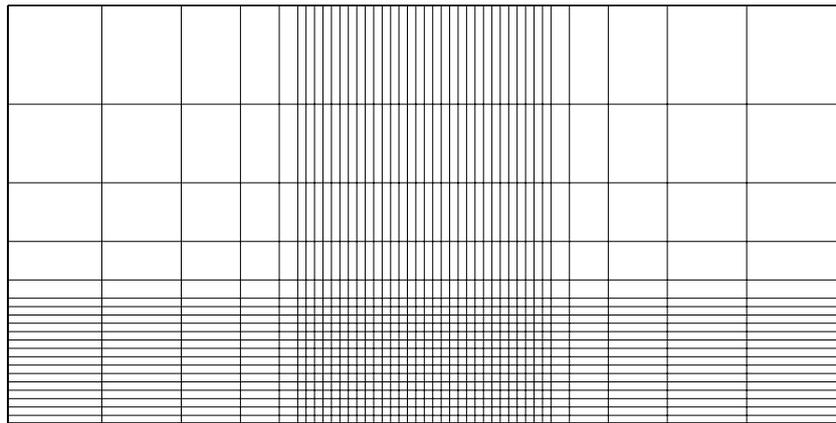


Figure 3.9: Maillage irrégulier : la bulle est au centre en bas. Une cellule sur dix est représentée.

Les propriétés physiques et le confinement sont les mêmes que précédemment. En revanche, la perturbation initiale vaut $\varepsilon=0,05$ (un cas $\varepsilon=0,01$ et $\Delta x \approx l_{osc}/10$ nécessiterait trop de cellules de calcul). La figure 3.10 présente (a) l'évolution du rapport de forme (b) le spectre en fréquence associé. L'échelle de temps adimensionnelle est : $\tau = t / \sqrt{\frac{\rho_1 a^3}{\sigma}}$.

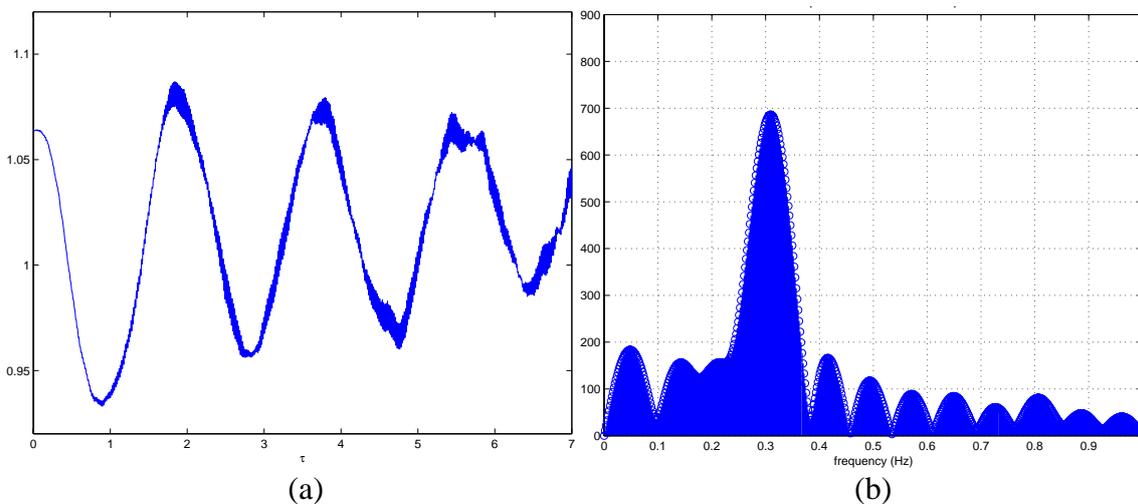


Figure 3.10: (a) Evolution du rapport de forme de la bulle. (b) Spectre en fréquence du signal.

Comme évoqué précédemment, les oscillations sont moins bruitées que dans le cas $\varepsilon=0,01$. La fréquence de la figure 3.10b correspondant au pic a une valeur $f_2=0,3095 \text{ s}^{-1}$. Cette valeur diffère de 0,8% de celle donnée par (3.3). Ceci montre que le phénomène d'oscillation est bien reproduit par la méthode de capture d'interface, quand le pas d'espace est adapté à la longueur caractéristique du phénomène à décrire.

4) *Étalement d'une lentille sur un bain fluide*

Cette section traite de l'étalement d'une goutte sur un bain fluide. L'objectif est de vérifier le bon comportement du modèle de forces capillaires pour un écoulement triphasique (relation 1.10). Considérons une goutte hémisphérique de fluide A posée sur une interface initialement plane séparant deux fluides B et C (voir figure 3.11). Les densités des fluides sont notées ρ_A, ρ_B, ρ_C ($\rho_C \ll \rho_A < \rho_B$), les viscosités μ_A, μ_B, μ_C et les tensions de surface $\sigma_{AB}, \sigma_{BC}, \sigma_{AC}$. Les propriétés des fluides sont les suivantes :

Masses volumiques $\rho_A - \rho_B - \rho_C$	1000 – 5000 – 1,3 kg/m ³
Viscosités dynamiques $\mu_A - \mu_B - \mu_C$	1 – 1 – 1.10 ⁻³ kg/(m.s)
Tensions de surface $\sigma_{AB} - \sigma_{BC} - \sigma_{AC}$	0,296 – 0,148 – 0,148 N/m
Diamètre de la goutte d	0,04 m
Gravité g	9,81 m/s ²

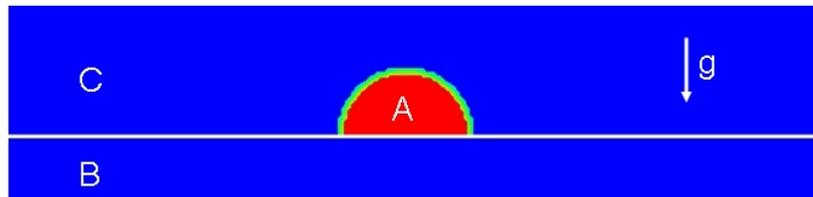


Figure 3.11: Goutte posée sur un bain fluide.

La simulation est tridimensionnelle, le maillage utilisé comporte $150 \times 150 \times 60$ cellules de calcul et a pour dimensions $6d \times 6d \times 1,5d$. Suivant la direction verticale z , les mailles sont régulières ($\Delta z = 0,001 \text{ m} = d/40$) tandis que suivant les directions x et y elles sont d'abord régulières dans la zone d'étalement de la goutte ($\Delta x = \Delta y = 0,001 \text{ m}$) puis irrégulières dans les zones externes. Les conditions aux limites sont des symétries partout. Le domaine de calcul est présenté sur la figure 3.12. Le modèle utilisé pour représenter la force capillaire est celui donné par la relation (1.10).

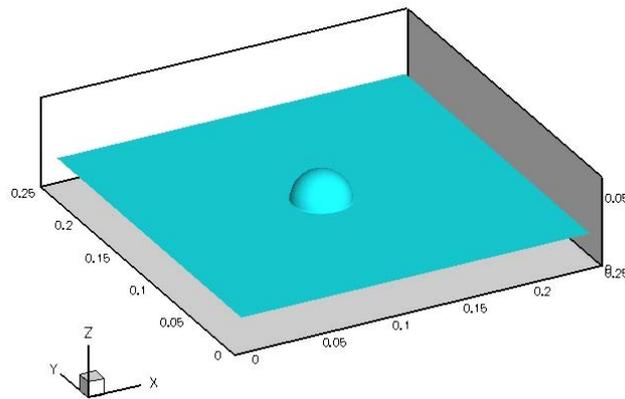


Figure 3.12: Domaine de calcul.

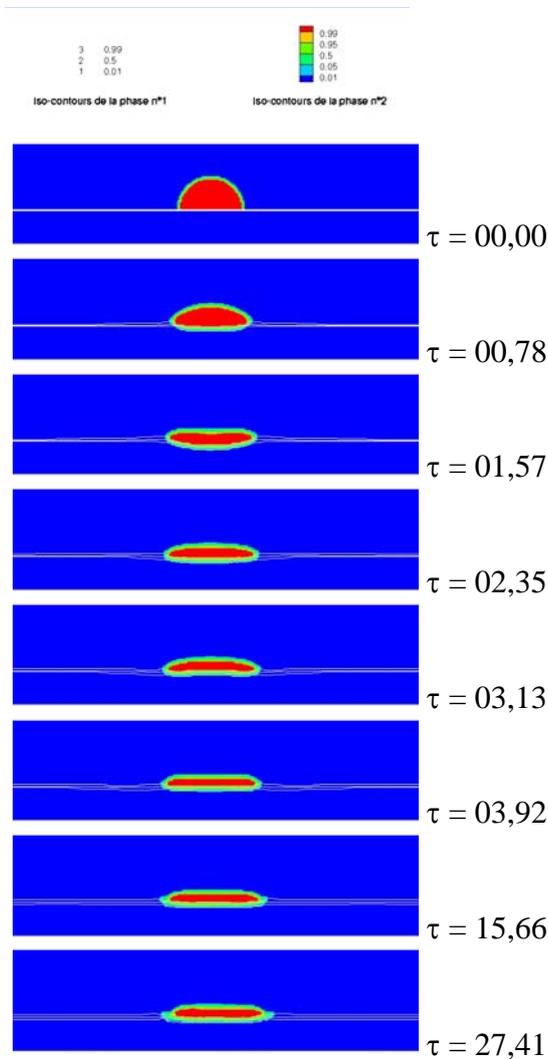


Figure 3.13: Etalement d'une goutte sur un bain fluide. Coupe verticale dans le plan médian.
 $\tau=t(g/d)^{1/2}$.

La figure 3.13 montre l'évolution de la goutte au cours du temps. Sous l'effet de la gravité, celle-ci s'écrase pour atteindre très rapidement (en quelques dixièmes de seconde) une forme aplatie de lentille. Les oscillations de la goutte sont amorties rapidement car les fluides ont été délibérément choisis visqueux pour atteindre l'état final plus rapidement. Il est possible de déterminer analytiquement l'épaisseur finale e_f de la lentille en calculant l'énergie du système et en minimisant celle-ci (*De Gennes et al. 2002*). En considérant $\rho_C \ll (\rho_A, \rho_B)$ cette épaisseur s'exprime uniquement en fonction des propriétés des fluides par :

$$e_f = \sqrt{\frac{-2\rho_B(\sigma_{BC} - \sigma_{AC} - \sigma_{AB})}{\rho_A(\rho_B - \rho_A)g}} \quad (3.4)$$

Avec les fluides choisis, $e_f = 8,7\text{mm}$. La figure 3.14 compare l'épaisseur théorique avec celle issue de la simulation : les deux valeurs sont en très bon accord. Le modèle de force capillaire semble donc reproduire convenablement les interactions qui ont lieu aux interfaces et notamment aux points de la ligne triple.

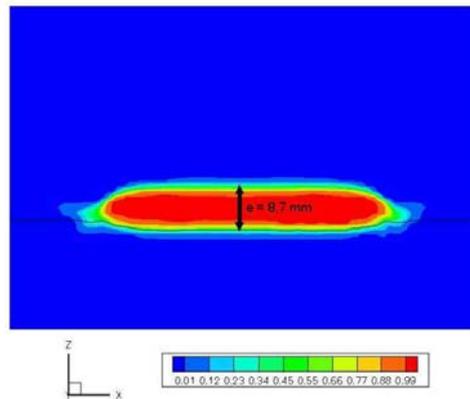


Figure 3.14: Epaisseur finale de la lentille. La flèche correspond à l'épaisseur théorique.

Au vu des différents cas traités dans cette section, l'outil numérique est capable de décrire correctement les écoulements diphasiques dont les effets dominants sont d'origine gravitaire ou capillaire. Qu'en est-il pour les écoulements où ce sont les effets visqueux qui prédominent ?

II. Phénomènes visqueux

L'objet de cette partie vise à montrer la capacité du modèle de tenseur des contraintes visqueuses exposé au Chapitre 1 – Partie II – Section 1 à décrire les écoulements diphasiques pour lesquels les effets visqueux jouent un rôle central : c'est notamment le cas de l'écoulement de Poiseuille à deux couches et de la sédimentation d'un réseau d'inclusions.

1) *Écoulement de Poiseuille diphasique*

Cet exemple concerne un écoulement plan établi de Poiseuille à deux couches engendré par un gradient de pression. La continuité des contraintes visqueuses à l'interface est primordiale car le fluide le plus visqueux est entraîné par le fluide moins visqueux. Puisque l'interface entre les deux couches est plane, seules les contraintes tangentielles interviennent. Le problème est schématisé sur la figure 3.15.

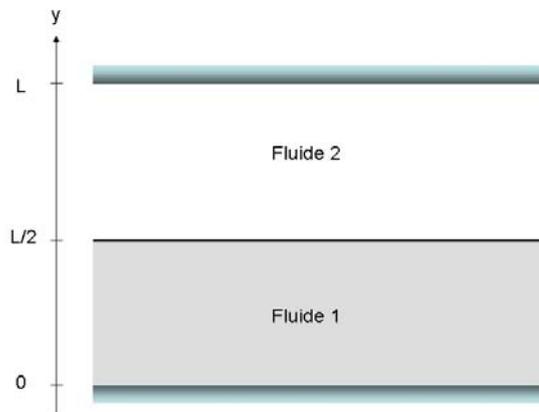


Figure 3.15: *Écoulement de Poiseuille à deux couches.*

Considérons un domaine carré de taille L partagé en deux parties égales par une interface plane. Le maillage comporte 40×40 cellules de calcul. Les conditions aux limites sont des parois sur les frontières horizontales et périodiques sur les frontières verticales. Les paramètres du calcul sont résumés dans le tableau ci-dessous. Ils sont choisis de telle façon que l'on ait : $\rho_1 \frac{dP}{dx} \frac{L^3}{\mu_1} = 0,0169$.

Masse volumique du fluide inférieur ρ_1	1,3 kg/m ³
Masse volumique du fluide supérieur ρ_2	1,3 kg/m ³
Viscosité dynamique fluide inférieur μ_1	1.10 ⁻³ kg/(m.s)
Viscosité dynamique fluide supérieur μ_2	2.10 ⁻⁵ kg/(m.s)
Gradient de pression moyen dP/dx	-1,8.10 ⁻⁸ Pa/m
Dimensions du domaine L	1 m
Rapport de densité ρ_1/ρ_2	1
Rapport de viscosité μ_1/μ_2	50

Le champ de vitesse analytique dans le cas où l'interface est à mi-hauteur du canal s'écrit :

$$U(y) = \begin{cases} \frac{1}{\mu_1 + \mu_2} \left(\frac{3}{2} + \frac{\mu_1}{2\mu_2} \right) \frac{L}{2} \frac{dP}{dx} (y-L) + \frac{1}{2\mu_2} \frac{dP}{dx} (y-L)^2 & \text{si } y \geq \frac{L}{2} \\ \frac{1}{\mu_1 + \mu_2} \left(-\frac{3}{2} - \frac{\mu_2}{2\mu_1} \right) \frac{L}{2} \frac{dP}{dx} y + \frac{1}{2\mu_1} \frac{dP}{dx} y^2 & \text{si } y \leq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3.5)$$

Dans cette configuration, la direction de l'interface est fixe et $\mathbf{n}=(0,1,0)_{(x,y,z)}$. L'expression du tenseur des contraintes se simplifie dans le cas des modèles à une et deux viscosités et les équations (1.3) et (1.5) se réduisent à :

$$\mathbf{T}_{1\text{viscosité}} = \begin{bmatrix} 2\mu_L \frac{\partial U}{\partial x} & \mu_L \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) \\ \mu_L \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) & 2\mu_L \frac{\partial V}{\partial y} \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{T}_{2\text{viscosités}} = \begin{bmatrix} 2\mu_L \frac{\partial U}{\partial x} & \mu_H \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) \\ \mu_H \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) & 2\mu_L \frac{\partial V}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Si de plus la vitesse est unidirectionnelle et seulement dépendante de y comme c'est le cas ici les équations (3.6) dégènerent en :

$$\mathbf{T}_{1\text{viscosité}} = \begin{bmatrix} 0 & \mu_L \frac{dU}{dy} \\ \mu_L \frac{dU}{dy} & 0 \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{T}_{2\text{viscosités}} = \begin{bmatrix} 0 & \mu_H \frac{dU}{dy} \\ \mu_H \frac{dU}{dy} & 0 \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

La seule différence entre les deux modèles réside donc dans le calcul de la viscosité relative aux contraintes tangentielles. La figure 3.16 compare la vitesse calculée avec les deux modèles et la solution analytique.

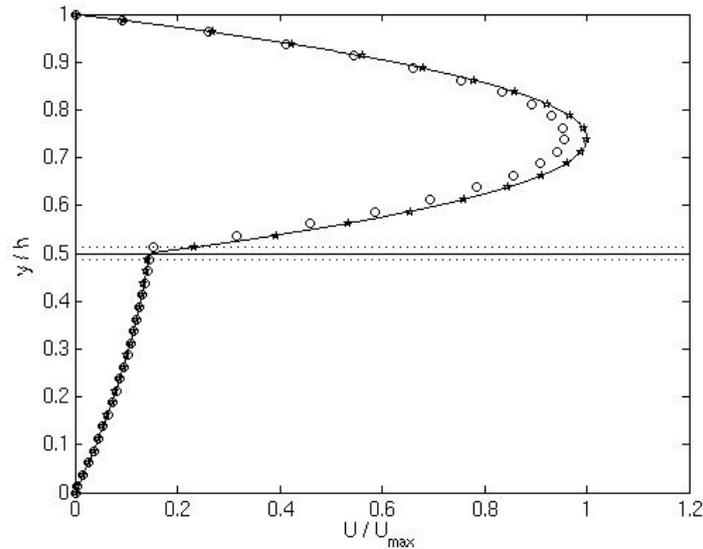


Figure 3.16: Profil de vitesse dans un écoulement de Poiseuille à deux couches permanent.
 (—) solution analytique ; (o) modèle à une viscosité ; (★) modèle à 2 viscosités.
 L'iso-contour $C=0,5$ est représenté par le trait continu, la région de transition par les pointillés.

Même si la différence entre les deux profils calculés n'est pas très spectaculaire, le profil issu du modèle à deux viscosités est en parfait accord avec la solution analytique, tandis que le modèle à une viscosité sous-estime la vitesse du fluide peu visqueux, notamment dans la zone proche de l'interface. Ce résultat confirme les observations de *Coward et al. 1997* qui étudient la stabilité d'un écoulement de Couette à deux couches : ils soulignent l'importance du calcul de la viscosité aux points de la zone de transition et remarquent que dans le cas où l'interface est horizontale, ils ne retrouvent le bon taux de croissance de l'instabilité que si la viscosité utilisée est la viscosité harmonique μ_H .

Examinons maintenant un cas où l'interface n'est plus fixe, plane et parallèle à une des directions du maillage, mais courbe et en mouvement.

2) *Sédimentation d'un réseau de cylindres*

Cet exemple concerne la sédimentation d'un réseau homogène de cylindres infinis dans un fluide visqueux. Il est bien connu qu'un cylindre ne tombe pas à la même vitesse dans un fluide visqueux s'il est seul où s'il y a d'autres cylindres autour de lui : cette vitesse dépend de la distance qui sépare les cylindres et de leur orientation par rapport à la direction de sédimentation. Ce problème est résolu analytiquement par *Sangani & Acrivos 1982* qui déterminent la vitesse de sédimentation d'un réseau carré et hexagonal de cylindres en fonction de la distance de séparation (ou de façon équivalente en fonction de la fraction volumique). Considérons sur la figure 3.17 un réseau de cylindres de diamètre d , espacés de centre à centre d'une distance h .

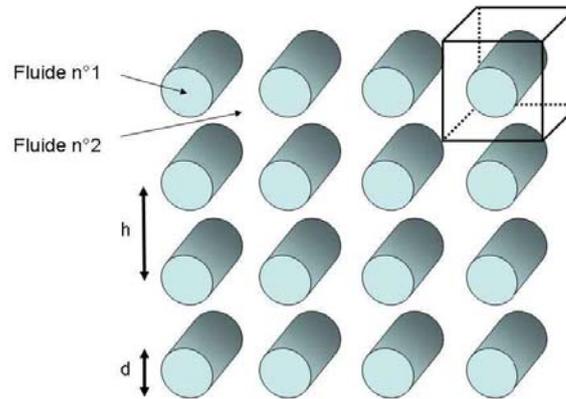


Figure 3.17: Réseau carré de cylindres.

Nous avons représenté sur la figure 3.17 une cellule élémentaire de l'écoulement : c'est le volume minimum pour lequel l'écoulement est périodique. Cette cellule correspond au domaine de calcul utilisé qui a donc pour dimension h^2 . Pour faire varier la fraction volumique des cylindres, il suffit donc de faire varier la taille de la boîte de calcul. Le calcul est bidimensionnel et les conditions aux limites sont périodiques dans les deux directions. Les propriétés des fluides sont choisies de telle manière que les cylindres fluides (indexés par 1) se comportent comme des solides indéformables. Les propriétés physiques des deux phases sont résumées dans le tableau suivant :

Masse volumique des cylindres ρ_1	1870 kg/m ³
Masse volumique du fluide environnant ρ_2	1000 kg/m ³
Viscosité dynamique des cylindres μ_1	522,9 kg/(m.s)
Viscosité dynamique du fluide environnant μ_2	5,229 kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	90,181 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre des cylindres d	0,03 m
Nombre de Bond Bo	0,1
Nombre de Morton Mo	10 ⁻⁵
Rapport de densité ρ_1/ρ_2	1,87
Rapport de viscosité μ_1/μ_2	100

Plusieurs fractions volumique ont été simulées et ce avec les deux modèles de contraintes visqueuses. Les paramètres numériques fixes pour toutes les simulations sont le pas d'espace $\Delta x = \Delta y = 10^{-3}$ m, le nombre de cellules de calcul par diamètre de cylindre (il est de l'ordre de 30) et le pas de temps $\Delta t = 10^{-5}$ s. Les conditions aux limites du domaine de calcul étant périodiques dans la direction de la gravité, nous imposons une force volumique supplémentaire d'intensité égale à $(\rho_1 + \rho_2)g/2$ qui annule le débit global dans le domaine de calcul (*Unverdi & Tryggvason 1992*). Nous avons recensé les dimensions des maillages utilisés pour chaque fraction volumique dans le tableau 3.3 ci-après.

Fraction volumique	Dimensions du maillage
0,05	119 × 119
0,1	84 × 84
0,2	59 × 59
0,3	49 × 49
0,4	42 × 42
0,5	38 × 38

Tableau 3.3: Maillages utilisés

La figure 3.18 présente les résultats de vitesse de sédimentation pour différentes fractions volumiques et pour les deux modèles de contraintes visqueuses. Ces vitesses sont adimensionnées par la vitesse de chute U_S d'un cylindre en milieu infini et sont comparées à la solution analytique de *Sangani & Acrivos 1982*. La vitesse U_S est calculée par résolution de l'équation (3.8) et vaut $U_S=0,180$ m/s.

$$(\rho_1 - \rho_2) \pi \left(\frac{d}{2}\right)^2 g = \frac{4\pi\mu_2 U_S}{\frac{1}{2} - \gamma - \ln\left(\frac{\rho_2 U_S d}{8\mu_2}\right)} \quad \text{avec } \gamma=0,577 \quad (3.8)$$

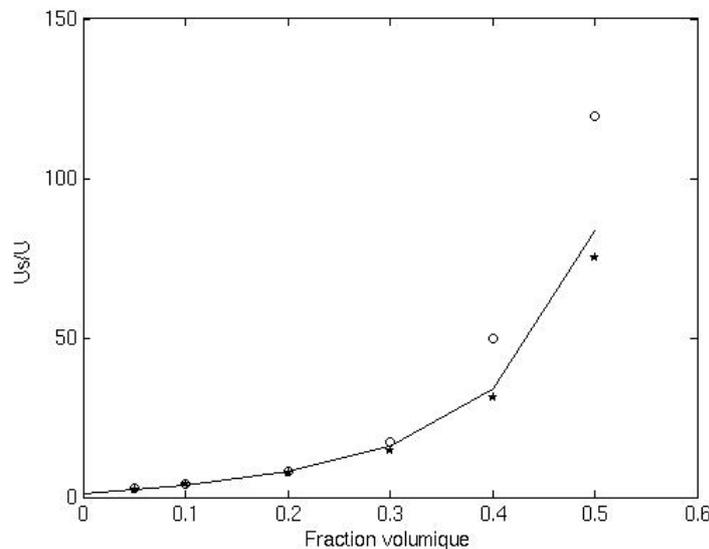


Figure 3.18: Vitesses de sédimentation d'un réseau de cylindres en fonction de la fraction volumique. (—) solution *Sangani & Acrivos 1982* ; (o) modèle à une viscosité ; (★) modèle à 2 viscosités. U_S : vitesse de Stokes du cylindre isolé.

Le modèle à une viscosité sous-estime la vitesse de sédimentation des cylindres d'autant plus que la fraction volumique est grande. Les résultats du modèle à deux viscosités sont en bien meilleur accord avec la solution analytique. Pour confirmer ce résultat nous avons considéré le cas tridimensionnel équivalent de la sédimentation d'un réseau de sphères.

3) Sédimentation d'un réseau de sphères

La vitesse de sédimentation d'une sphère de diamètre d , de densité ρ_1 , de viscosité dynamique μ_1 , dans un milieu infini de densité ρ_2 et de viscosité dynamique μ_2 est donnée par la relation de Hadamard-Rybczynski (*Batchelor 1967*) :

$$U_s = \frac{2}{3\mu_2}(\rho_2 - \rho_1) \left(\frac{d}{2}\right)^2 \frac{1 + \mu_1/\mu_2}{2 + 3\mu_1/\mu_2} g \quad (3.9)$$

Dans le cas d'un réseau de sphères, la vitesse de sédimentation varie avec la fraction volumique et le rapport des viscosités μ_1/μ_2 . Une solution analytique à ce problème a été obtenue par *Sangani 1987*. Le réseau de sphères est schématisé sur la figure 3.19.

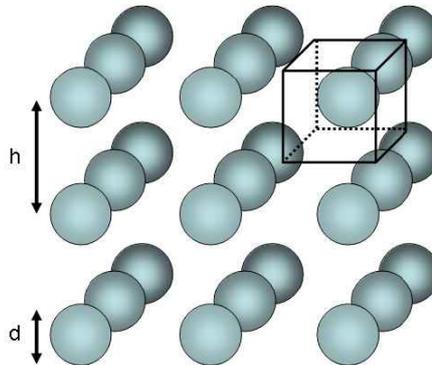


Figure 3.19: Réseau cubique simple de sphères.

Comme pour le réseau de cylindres, le domaine de calcul correspond à la cellule élémentaire de l'écoulement et a pour dimensions h^3 . Le calcul est tridimensionnel et les conditions aux limites sont périodiques dans les trois directions. Nous avons simulé trois rapports de viscosité différents : $\mu_1/\mu_2=100$ - $\mu_1/\mu_2=1$ - $\mu_1/\mu_2=0,01$. Ceci correspond respectivement à la sédimentation de sphères solides, de gouttes et de bulles de gaz. Toutes les propriétés physiques sont identiques dans les trois cas excepté la viscosité des sphères. Ces propriétés sont :

Masse volumique des sphères ρ_1	1870 kg/m ³
Masse volumique du fluide environnant ρ_2	1000 kg/m ³
Viscosité dynamique des sphères μ_1	522,9 - 5,229 - 5,229.10 ⁻² kg/(m.s)
Viscosité dynamique du fluide environnant μ_2	5,229 kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	90,181 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre des sphères d	0,03 m
Nombre de Bond Bo	0,1
Nombre de Morton Mo	10 ⁻⁵
Rapport de densité ρ_1/ρ_2	1,87
Rapport de viscosité μ_1/μ_2	100 - 1 - 0,01

Les paramètres numériques sont les mêmes que pour le réseau de cylindres excepté les dimensions des maillages (voir le tableau 3.4).

Fraction volumique	Dimensions du maillage
0,05	66^3
0,1	52^3
0,2	41^3
0,3	36^3

Tableau 3.4: Maillages utilisés

La figure 3.20 présente les vitesses de sédimentation du réseau de sphère obtenues pour différentes fractions volumiques et pour les deux modèles de contraintes visqueuses. Ces vitesses sont adimensionnées par la vitesse de chute U_S (équation 3.9) et sont comparées à la solution analytique de Sangani 1987.

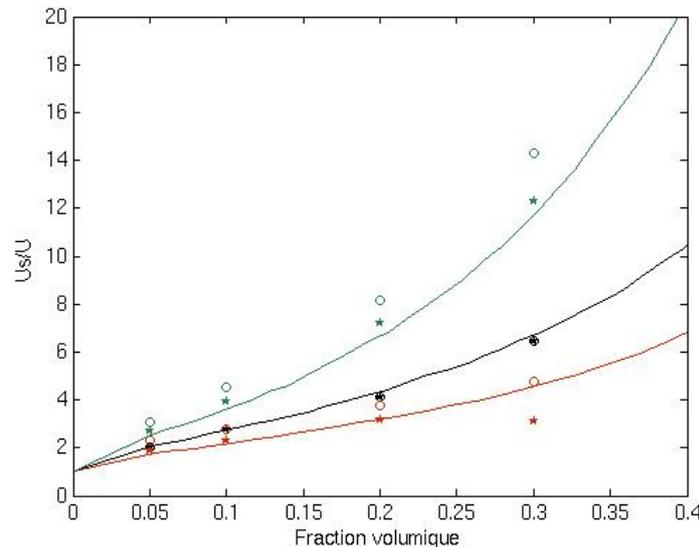


Figure 3.20: Vitesses de sédimentation d'un réseau de sphères en fonction de la fraction volumique. (—) solution de Sangani 1987 ; (o) modèle à une viscosité ; (★) modèle à 2 viscosités. Courbe supérieure : $\mu_1/\mu_2=100$ (sphères solides) ; Courbe médiane : $\mu_1/\mu_2=1$ (gouttes) ; Courbe inférieure : $\mu_1/\mu_2=0,01$ (bulles). U_S : vitesse de Stokes de la sphère isolée.

Comme pour le cas du réseau de cylindres, le modèle à une viscosité sous-estime la vitesse de sédimentation. Le modèle à deux viscosités reproduit beaucoup mieux la dynamique du réseau. Ce résultat confirme les observations de Scardovelli & Zaleski 1999 qui soulignent l'importance de l'interpolation de la viscosité sur la restitution de la physique de cet écoulement.

Au regard des différents cas examinés dans cette partie (écoulement de Poiseuille à deux couches, sédimentation de réseaux de cylindres et de sphères), il est clair que le modèle à deux viscosités permet de prendre en compte convenablement la physique des écoulements visqueux quelque soit l'orientation de l'interface.

III. Dynamique de bulles

1) *Montées d'une bulle isolée dans un liquide initialement au repos*

Cette section porte sur la simulation axisymétrique de la montée d'une bulle isolée dans un liquide initialement au repos. Les nombres adimensionnels pertinents sont le nombre de Reynolds Re , le nombre de Bond Bo (appelé aussi nombre d'Eötvös) et le nombre de Morton Mo (appelé aussi nombre de Kapitsa). Ils sont définis par :

$$Re = \frac{\rho_l V d}{\mu_l} \quad (3.10)$$

$$Bo = \frac{\rho_l g d^2}{\sigma} \quad (3.11)$$

$$Mo = \frac{g \mu_l^4}{\rho_l \sigma^3} \quad (3.12)$$

où d est le diamètre initial de la bulle, ρ_l la densité du liquide, μ_l la viscosité dynamique du liquide, g la gravité, σ la tension de surface, V la vitesse barycentrique de la bulle. Cette vitesse est définie par la relation :

$$V(t) = \frac{\int_{\mathcal{V}} C(\mathbf{x}, t) \mathbf{V}(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z \, d\mathcal{V}}{\int_{\mathcal{V}} C(\mathbf{x}, t) \, d\mathcal{V}} \quad (3.13)$$

où \mathcal{V} est le volume du domaine de calcul, C la fraction volumique du gaz, \mathbf{V} la vitesse locale du fluide et \mathbf{e}_z le vecteur unitaire parallèle à \mathbf{g} . Cette vitesse $V(t)$ est calculée à posteriori. En pratique, nous fixons le nombre de Bond et le nombre de Morton et nous calculons le nombre de Reynolds qui est un résultat de la simulation.

Ascension à nombre de Reynolds modéré

Cette partie traite le cas de bulles se déformant beaucoup mais évoluant à des nombres de Reynolds de l'ordre de la dizaine. La partie suivante traite le cas de bulles qui se déforment peu mais pour lesquelles le nombre de Reynolds est de l'ordre de la centaine.

Les paramètres sont choisis de façon à obtenir les mêmes valeurs de nombre de Bond et de Morton que dans certaines des expériences de *Bhaga & Weber 1981* (figure 3.c). Ils sont résumés dans le tableau suivant :

Masse volumique du liquide ρ_l	1000 kg/m ³
Masse volumique dans la bulle ρ_g	10 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	6,346.10 ⁻¹ kg/(m.s)
Viscosité dynamique dans la bulle μ_g	6,346.10 ⁻³ kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	0,3383 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre de la bulle d	0,02 m
Nombre de Morton M	41,1
Nombre de Bond Bo	116
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	100
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	100

Le maillage choisi comporte 140×700 cellules de calcul dans les directions (r,z) avec des pas d'espace réguliers $\Delta r = \Delta z = 3,57.10^{-4}$ m dans la région traversée par la bulle, et des pas d'espace Δr croissant arithmétiquement vers la frontière latérale du domaine. Ce choix permet de positionner 60 cellules de calcul par diamètre initial de bulle et de placer la frontière latérale du domaine à une distance de 5,5 diamètres du centre de la bulle. Les conditions aux limites sont des symétries sur la frontière verticales et des parois sur les frontières horizontales.

L'évolution de la forme de la bulle est présentée sur la figure 3.21 ; le domaine de calcul est repéré par les lignes noires (la forme observée par *Bhaga & Weber 1981* est donnée sur la figure 3.22). La figure 3.23 compare la vitesse calculée avec la vitesse terminale mesurée expérimentalement. Notons sur la figure 3.21 que la raideur de l'interface est conservée durant toute la simulation. Il y a cependant un léger étalement dans la région de pincement de l'interface où l'étirement et la courbure sont grands, mais cet étalement ne concerne que l'iso-contour $C=0,01$ (les iso-contours $C=0,5$ et $0,99$ restent très proches). L'accord entre les vitesses terminales simulée et expérimentale, ainsi qu'entre les formes finales des bulles est très bon. Le nombre de Reynolds terminal est de 7,2. La même simulation a été réalisée dans un domaine de calcul dont les frontières sont à 10,5 diamètres du centre de la bulle et la différence avec les vitesses évoquées précédemment est inférieure à 2%.

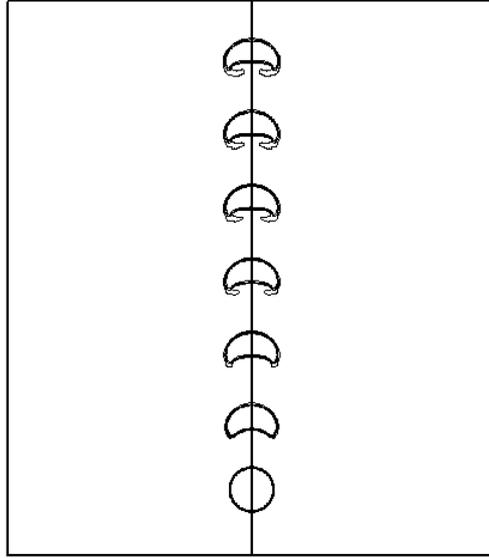


Figure 3.21: Montée d'une bulle dans un fluide visqueux. Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$; $d=60\Delta r$; $\rho_l/\rho_g=100$, $\mu_l/\mu_g=100$; $Mo=41,1$; $Bo=116$; $Re\approx 7,2$.



Figure 3.22: Forme terminale observée par Bhaga & Weber 1981 (Fig. 3.c).

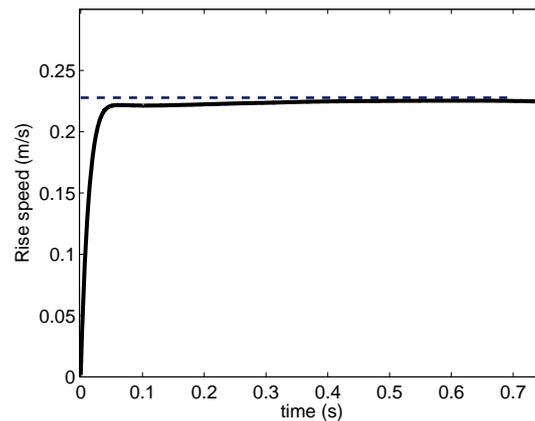


Figure 3.23: Evolution de la vitesse d'ascension de la bulle.
(—) Simulation; (----) Vitesse terminale mesurée par Bhaga & Weber 1981 (Fig. 3.c).

Nous présentons maintenant un autre cas déjà traité par plusieurs auteurs pour valider les méthodes numériques destinées à simuler des écoulements diphasiques (Ryskin & Leal 1984, Blanco 1995, Sussman & Smereka 1997, Gueyffier et al. 1999, Oka & Ishii 1999, Sussman & Puckett 2000). Il

correspond au cas A des expériences de *Hnat & Buckmaster 1976* ; les paramètres adimensionnels sont $Mo=0,065$; $Bo=39,6$. En gardant le même maillage que précédemment et en changeant les paramètres physiques des fluides, nous obtenons comme nombre de Reynolds terminal $Re=19,3$ (respectivement 19,9) quand les frontières latérales sont situées à 5,5 (respectivement 10,5) diamètres du centre de la bulle, ce qui est en excellent accord avec la valeur expérimentale de 19,6. Enfin la figure 3.24 qui compare la forme de la bulle et les lignes de courant dans son sillage avec celles issues de la visualisation de *Hnat & Buckmaster 1976*, permet de vérifier que la structure de l'écoulement autour de la bulle et dans le sillage de la bulle est correctement reproduite.

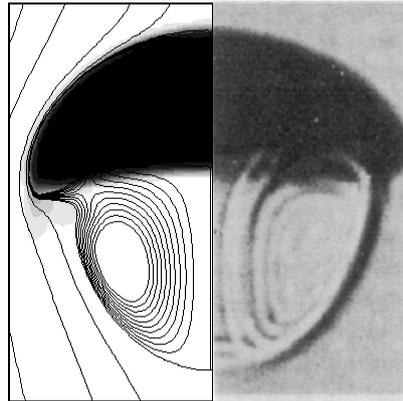


Figure 3.24: Comparaison de la forme de la bulle calculée et des lignes de courant dans le sillage avec la Figure 1.A de *Hnat & Buckmaster 1976*. La zone noire de la partie gauche correspond aux régions où $C>0,99$ et la zone blanche aux régions où $C<0,01$.

Ascension à grand nombre de Reynolds

Cette partie concerne le cas de bulles qui se déforment peu mais pour lesquelles le nombre de Reynolds est de l'ordre de la centaine. La résolution du maillage ne change pas. Par contre sa hauteur est plus grande pour permettre d'atteindre le régime stationnaire. Il y a donc 140×900 cellules de calcul. Les propriétés des fluides sont :

Masse volumique du liquide ρ_l	1000 kg/m ³
Masse volumique dans la bulle ρ_g	10 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	$1,32471 \cdot 10^{-1}$ kg/(m.s)
Viscosité dynamique dans la bulle μ_g	$1,32471 \cdot 10^{-3}$ kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	3,924 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre de la bulle d	0,02 m
Nombre de Morton M	$5 \cdot 10^{-8}$
Nombre de Bond Bo	1
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	100
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	100

Les figures 3.25 et 3.26 montrent l'évolution de la forme et de la vitesse de la bulle au cours du temps. La bulle prend une forme finale ellipsoïdale dont le rapport de forme mesuré est égal à 1,42. De plus, elle a bien atteint un régime stationnaire, dont le nombre de Reynolds est 101,6. Comme le

nombre de Weber $We = \rho_1 V^2 D / \sigma$ est relié aux autres paramètres adimensionnels par $We = Re^2 (Mo/Bo)^{1/2}$, on obtient $We \approx 2,31$. Les expériences de montée de bulles d'air dans de l'eau ultra pure de *Duineveld 1995* indiquent que pour cette valeur du nombre de Weber, le rapport de forme de la bulle est de 1,43, ce qui est en excellent accord avec les résultats numériques.

Cet exemple est particulièrement intéressant car il a été également simulé avec une autre version du code JADIM qui emploie une approche du type « boundary fitted » est qui est basée sur le même noyau central de résolution des équations de Navier-Stokes que la version présente. La principale différence entre les deux codes est illustrée sur la figure 3.27. Alors que la présente version utilise un maillage cartésien fixe et capture les interfaces comme décrit dans les chapitres 1 et 2, la version « boundary fitted » utilise un maillage curviligne orthogonal qui épouse exactement la forme de la bulle et permet de décrire très finement l'hydrodynamique de l'écoulement dans les régions proches de l'interface. Cette version de JADIM ainsi que la génération des maillages curvilignes sont décrits dans *Magnaudet et al. 1995*, *Blanco & Magnaudet 1995*, *Legendre & Magnaudet 1998* et *Legendre et al. 2003*. Ici nous utilisons la version « boundary fitted » pour calculer la force de traînée finale subie par la bulle en supposant qu'elle reste immobile dans un écoulement uniforme de vitesse V_0 à l'infini amont et que sa forme est figée. Nous choisissons comme forme un ellipsoïde de rapport de forme 1,42. Pour un nombre de Reynolds $Re_0 = \rho_1 V_0 d / \mu_1$ donné, la simulation fournit une force de traînée $F_D = \rho_1 \pi d^2 C_D^{BF} V_0^2 / 8$ à partir de laquelle le coefficient de traînée $C_D^{BF}(Re_0)$ est obtenu. Parallèlement, la version « capture d'interfaces » prédit la vitesse terminale V de la bulle et le coefficient de traînée C_D est obtenu en équilibrant les effets de flottabilité et les effets visqueux de sorte que $C_D = 4g(1 - \rho_g / \rho_l) V^2 d / 3$. Nous trouvons $C_D = 0,572$ tandis que $C_D^{BF}(Re_0 = 101,6) = 0,576$, ce qui montre l'excellent accord des deux approches. La comparaison de la structure locale de l'écoulement au voisinage de l'interface (lignes de courant, lignes iso-vorticité) révèle également un très bon accord (voir les figures 3.28 et 3.29). Ceci permet de conclure que la méthode de suivi d'interface est capable de décrire finement l'hydrodynamique des bulles même si la couche limite au voisinage de l'interface n'est pas résolue aussi précisément que dans les approches de type « boundary fitted ».

Afin de mettre en évidence l'effet des modifications de la technique de transport de C développées au Chapitre 2, nous avons simulé le même cas en désactivant ces modifications ($\tilde{V} = V$ et $\tilde{C} = C$). Les résultats sont présentés sur les figures 3.30 et 3.31. L'interface s'étale très rapidement au point que l'iso-contour $C=0,99$ disparaît bien avant que la bulle n'ait atteint sa forme stationnaire. Sur la figure 3.25 la zone de transition reste étroite tout au long de la simulation. Notons aussi que la position de la bulle correspondant au temps final diffère singulièrement entre les figures 3.25 et 3.30, ce qui indique que la bulle est montée beaucoup moins vite dans le deuxième cas. Ceci montre que la modification (2.8) est cruciale pour maintenir les fronts raides dans les écoulements à grand nombre de Reynolds. La figure 3.31 montre l'évolution de la variation relative de masse de la bulle. Dans le cas où la procédure de conservation de la masse est active, la variation de masse oscille entre des valeurs positives et négatives dont l'intensité reste inférieure à 10^{-3} , correspondant au critère choisi pour le déclenchement de la procédure (voir équation 2.7). Dans le cas où la procédure est désactivée, la variation de masse augmente pour atteindre un maximum d'environ $3,5 \cdot 10^{-3}$ puis

reste relativement constante. Même si cette valeur n'est pas excessive dans le cas présent nous avons vu précédemment que les erreurs de masse pouvaient atteindre des valeurs bien plus importantes.

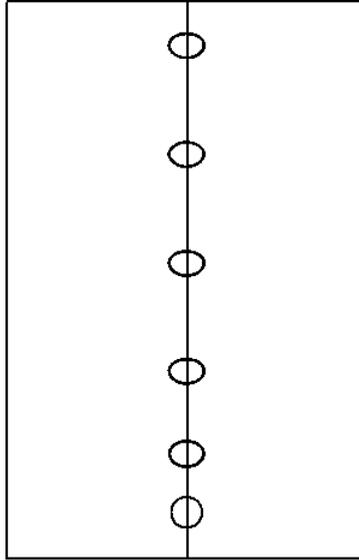


Figure 3.25: Montée d'une bulle de gaz dans un liquide peu visqueux ($\rho_l/\rho_g=10^2$, $\mu_l/\mu_g=10^2$, $Mo=5.10^{-8}$, $Bo=1$). Le rapport de forme final est 1,42, le nombre de Reynolds final est $Re \approx 101,6$.
(Iso-contours $C=0.01, 0.5, 0.99$) ; $\tau = t(g/d)^{1/2} = 0 - 2,02 - 3,88 - 6,20 - 8,53 - 10,85$.

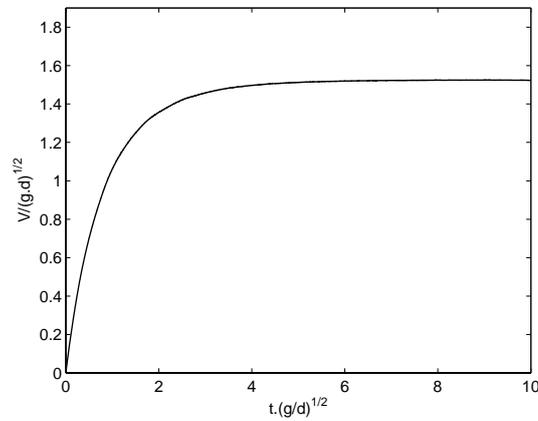


Figure 3.26: Evolution de la vitesse d'ascension de la bulle.

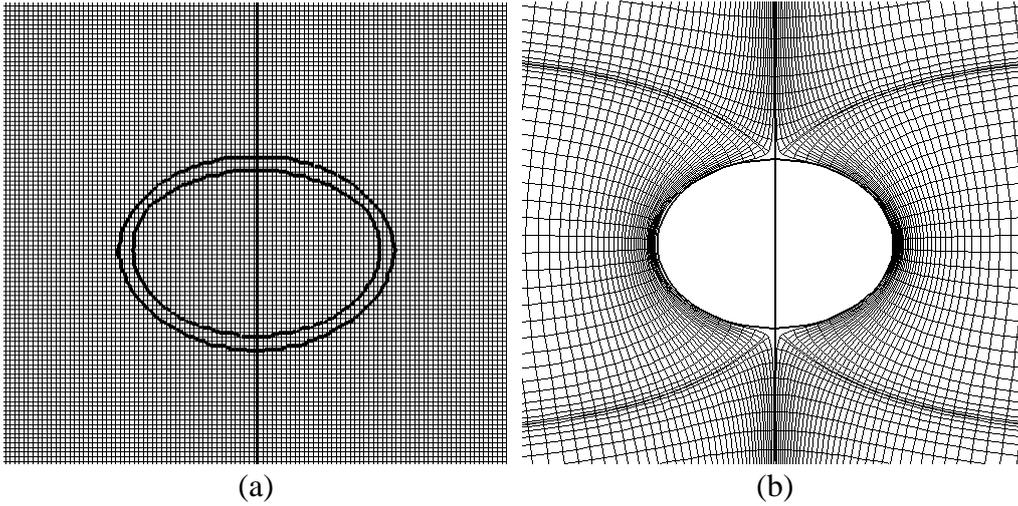


Figure 3.27: Maillages utilisés par deux versions du code JADIM.

(a) maillage cylindrique fixe de la version « capture d'interfaces » ;

(b) maillage de la version « boundary fitted » autour d'un ellipsoïde de rapport de forme 1,42.

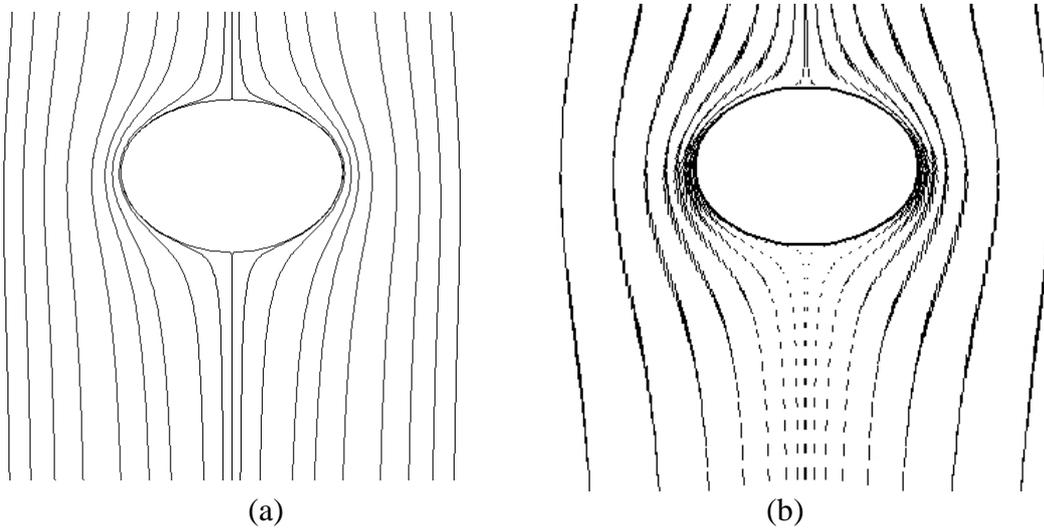


Figure 3.28: (a) forme de la bulle et lignes de courant obtenues par la présente méthode ;

(b) lignes de courant obtenues avec la version « boundary fitted ».

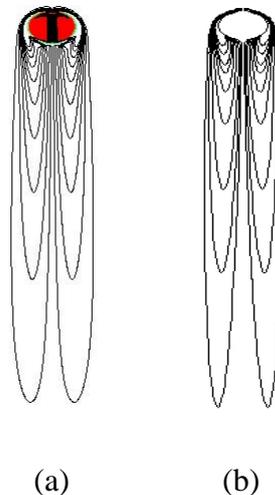


Figure 3.29: Suite de la comparaison des deux méthodes pour le champ de vorticité.

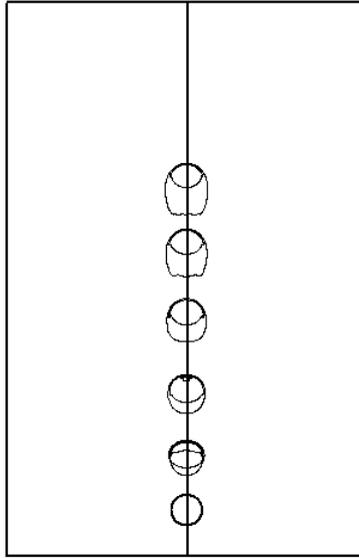


Figure 3.30: Identique à la figure 3.25 après avoir désactivé les modifications (2.7) et (2.8) (Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$).

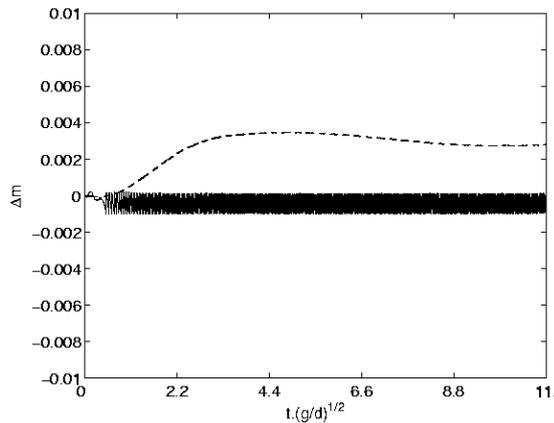


Figure 3.31: Evolution de la variation relative de masse de la bulle dans le cas de la figure 3.25 (trait continu) et 3.30 (trait pointillé).

Un exemple de convergence spatiale

Quel est le nombre minimum de cellules de calcul nécessaire par diamètre initial de bulle pour décrire correctement la dynamique de celle-ci ? Pour quantifier ce nombre, une simulation de montée de bulle est faite pour différentes résolutions spatiales depuis $\Delta r = \Delta z = d/10$ jusqu'à $\Delta r = \Delta z = d/90$. Les paramètres sont les suivants :

Masse volumique du liquide ρ_l	1000 kg/m ³
Masse volumique dans la bulle ρ_g	10 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	0,5 kg/(m.s)
Viscosité dynamique dans la bulle μ_g	0,5.10 ⁻² kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	0,3924 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre de la bulle d	0,02 m
Nombre de Morton M	10 ⁻²
Nombre de Bond Bo	10
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	100
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	100

Les figures 3.32 et 3.33 comparent la vitesse et la forme de la bulle pour les différentes résolutions. La vitesse terminale converge vers une courbe unique quand la résolution augmente. On observe que la vitesse terminale de la bulle obtenue pour $\Delta r=d/20$ n'est inférieure que de 5% à celle obtenue pour $\Delta r=d/90$. De plus on observe une bonne correspondance entre les formes des bulles pour toutes les résolutions sauf pour $\Delta r=d/10$. Ceci suggère que 20 cellules de calcul par diamètre initial de bulle est une borne inférieure acceptable pour décrire correctement la dynamique des bulles dans le régime considéré ici. Nous verrons plus loin que ce nombre peut augmenter considérablement lorsque les nombres de Bond et de Reynolds augmentent. Nous avons examiné l'évolution de l'erreur vis-à-vis de la résolution spatiale de trois indicateurs : la vitesse terminale V , la longueur du petit axe d_1 et la longueur du grand axe de la bulle d_2 . d_1 et d_2 sont calculés en mesurant la position de l'iso-contour $C=0,5$. L'erreur relative est calculée en prenant comme solution exacte la solution fournie par le maillage le plus raffiné ($\Delta r=d/90$). Les résultats sont recensés dans le tableau 3.5. L'ordre de convergence varie significativement pour les maillages grossiers, cependant on observe que pour $\Delta r \leq d/30$, les ordres de convergence des trois indicateurs sont supérieurs à 2.

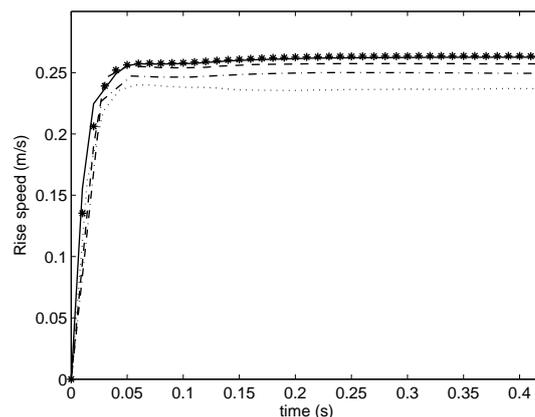


Figure 3.32: Vitesse d'ascension pour différentes résolutions spatiales.
 (.....) $d=10\Delta r$; (-.-.-) $d=20\Delta r$; (----) $d=30\Delta r$; (—) $d=60\Delta r$; (****) $d=90\Delta r$.



Figure 3.33: Forme finale des bulles pour différentes résolutions spatiales.
De gauche à droite : $d = 10\Delta r, 20\Delta r, 30\Delta r, 60\Delta r, 90\Delta r$. Iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$.

$\Delta r/d$	$ V - V_{Ex} /V_{Ex}$	Ordre	$ d_1 - d_{1Ex} /d_{1Ex}$	Ordre	$ d_2 - d_{2Ex} /d_{2Ex}$	Ordre
1/10	0,10067	-	0,04717	-	0,03378	-
1/20	0,05314	0,92	0,02014	1,23	0,02567	0,40
1/30	0,02384	1,98	0,01127	0,84	0,00743	1,79
1/60	0,00368	2,7	0,00007	7,33	0,00269	4,79
1/90	0,0	-	0,0	-	0,0	-

Tableau 3.5: Evolution de l'erreur sur la vitesse et la forme de la bulle en fonction de la résolution spatiale. V : vitesse terminale de la bulle. d_1 : petit axe de la bulle. d_2 : grand axe de la bulle.

2) Coalescence de deux bulles

On considère ici une simulation tridimensionnelle de la coalescence de deux bulles montant dans un liquide très visqueux. Les deux bulles ont initialement le même diamètre et sont légèrement décalées d'une distance centre-à-centre égale à un rayon suivant la direction horizontale et de 2,3 rayons suivant la direction verticale. Les paramètres sont :

Masse volumique du liquide ρ_l	1000 kg/m ³
Masse volumique dans la bulle ρ_g	50 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	0,4711 kg/(m.s)
Viscosité dynamique dans la bulle μ_g	1,8844.10 ⁻² kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	0,07848 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre de la bulle d	0,02 m
Nombre de Morton M	1
Nombre de Bond Bo	50
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	20
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	25

Ils correspondent à ceux des simulations de la figure 12 de *Unverdi & Tryggvason 1992*, de la figure 16 de *Sussman & Puckett 2000*, et de la figure 23 de *Shin & Juric 2002*. Le maillage comporte 60×60×120 cellules de calcul ($\Delta x=\Delta y=\Delta z=d/20$) soit initialement 20 cellules par diamètre de bulle. Les conditions aux limites sont des symétries sur les frontières verticales, et sont périodiques sur les frontières horizontales. Les résultats sont présentés sur la figure 3.34 (pour des raisons de lisibilité on ne présente que l'iso-surface $C=0,5$). Sous l'effet de la gravité les deux bulles montent et se déforment ; la bulle « suiveuse » profite de l'aspiration créée par le sillage de la première bulle pour la rattraper. Puis les deux bulles coalescent. La nouvelle bulle formée prend rapidement une forme ellipsoïdale. Ces observations sont en accord avec les simulations de *Shin &*

Juric 2002 ainsi qu'avec celles de *Sussman & Puckett 2000* qui utilisent respectivement une méthode de front tracking et la technique level set. A titre de comparaison la figure 3.35 présente les résultats de *Shin & Juric 2002* dans laquelle on retrouve la même évolution.

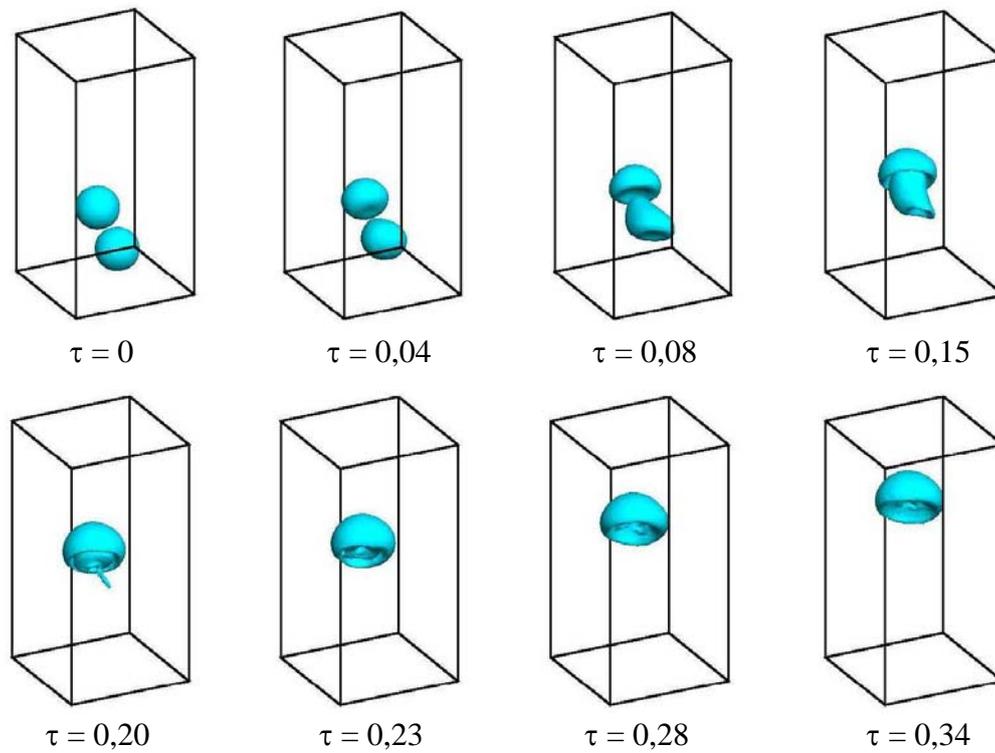


Figure 3.34: Coalescence de deux bulles avec la présente méthode ($\tau=t\mu/(\rho d^2)$; iso-surface $C=0,5$).

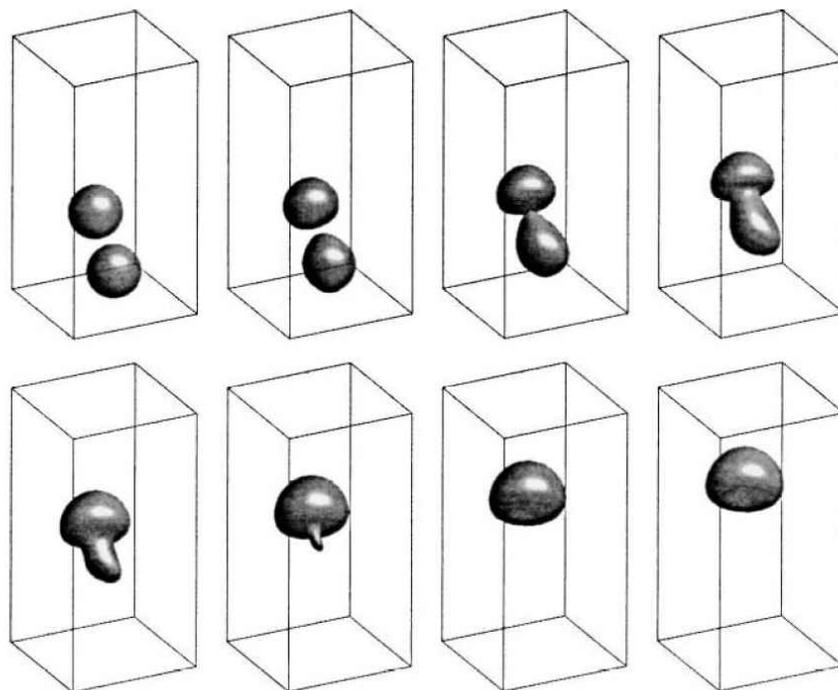


Figure 3.35: Résultats obtenus par *Shin & Juric 2002* avec une méthode de type Front Tracking.

3) *Montée de deux bulles sphériques côte à côte*

Dans un nuage de bulles en ascension, les interactions hydrodynamiques entre les bulles jouent un rôle majeur sur l'écoulement et sur l'évolution des bulles elles-mêmes. La complexité de ces interactions est d'autant plus grande que le taux de vide est important, que la distribution de taille des bulles est inhomogène, que les bulles se déforment et qu'elles sont ou non contaminées. L'interaction « simple » de deux bulles sphériques proches l'une de l'autre est aujourd'hui encore un sujet actif de recherche (Kok 1993, Smereka 1993, Sangani et Didwania 1993, Yuan & Prosperetti 1994, Legendre et al. 2003). Considérons sur la figure 3.36 le cas de deux bulles sphériques de même diamètre d situées l'une à côté de l'autre et dont les centres sont séparés par une distance h . Ce cas est particulièrement intéressant pour les applications car il est connu que pour des nombres de Reynolds modérés à grands, les bulles présentent une tendance à former des alignements horizontaux lorsqu'elles montent sous l'effet de la gravité.

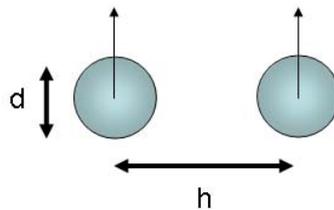


Figure 3.36: Deux bulles sphériques montant côte à côte.

Il est maintenant établi à la fois de façon expérimentale (Takemura & Magnaudet 2003) et numérique (Legendre et al. 2003), que la force latérale qui s'exerce sur les deux bulles dans cette situation change de signe à partir d'un nombre de Reynolds critique Re_0 de quelques dizaines. Cette force est répulsive (respectivement attractive) si le nombre de Reynolds de la bulle est inférieur (respectivement supérieur) à Re_0 . Elle résulte de la compétition entre les interactions produites par les deux champs de vorticités et celles dues aux effets irrotationnels (voir figure 3.37). Comme cette force latérale est de l'ordre de quelques pourcents de la force de traînée, il est intéressant de voir si notre technique numérique est capable de prédire ce changement de signe.

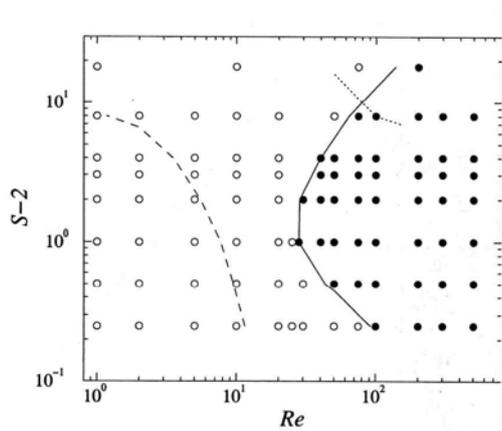


Figure 3.37: Sens de la force d'interaction entre deux bulles montant côte à côte (Legendre et al. 2003). $S=2h/d$; $Re=U_{bulle}d/\nu$; \bullet les bulles s'attirent ; \circ les bulles se repoussent.

Deux simulations tridimensionnelles sont réalisées pour une distance de séparation $h=1,5d$ et deux nombres de Reynolds $Re=10-50$. Elles correspondent aux points de coordonnées $(Re,S-2)=(10^1;10^0)-(5.10^1;10^0)$ sur la figure 3.37. Nous désignerons par cas n°1 le cas $(Re,S-2)=(10^1;10^0)$ et par cas n°2 le cas $(Re,S-2)=(5.10^1;10^0)$. L'objectif ici est de vérifier si l'on observe les deux types d'interaction à savoir la répulsion des bulles pour $Re=10$ et l'attraction pour $Re=50$ puisque la figure 3.37 indique que pour cette valeur de S la force d'interaction change de signe pour $Re=30$ environ. Les paramètres physiques sont choisis de sorte que les bulles restent sphériques (voir tableau ci-dessous).

Masse volumique du liquide ρ_l	1000 kg/m ³
Masse volumique dans la bulle ρ_g	10 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	cas n°1 : 0,55697 kg/(m.s) cas n°2 : 0,26338 kg/(m.s)
Viscosité dynamique dans la bulle μ_g	cas n°1 : 0,55697.10 ⁻² kg/(m.s) cas n°2 : 0,26338.10 ⁻² kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	9,81 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre de la bulle d	0,02 m
Nombre de Morton M	cas n°1 : 1.10 ⁻⁶ cas n°2 : 5.10 ⁻⁸
Nombre de Bond Bo	0,4
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	100
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	100

Le maillage comporte 90×60×90 cellules de calcul et a pour dimensions 9,5d×8d×4,5d. Suivant la direction d'ascension des bulles (direction z) les mailles sont régulières ($\Delta z=0,001m=d/20$) tandis que suivant les directions x et y elles sont d'abord régulières dans la zone de passage des bulles ($\Delta x=\Delta y=0,001m$) puis irrégulières dans les zones externes (voir figure 3.38). Les conditions aux limites sont des symétries sur les frontières verticales, et sont périodiques sur les frontières horizontales. Il y a initialement 10 cellules de calcul dans le « film » séparant les deux bulles. Les figures 3.39 et 3.40 présentent respectivement l'ascension des bulles dans les cas n°1 et n°2.

La figure 3.39 montre l'évolution de la paire de bulles dans le cas n°1. Comme attendu, les bulles s'écartent avec un angle de déflexion d'environ 1,5 degré. Cette valeur est faible mais cohérente au regard de la faible intensité de la force latérale par rapport à la force de traînée. Plus précisément *Legendre et al. 2003* indiquent que pour $Re=10$, le coefficient de traînée vaut 2,43 tandis que le coefficient de « portance » est de 0,15 (ces coefficients étant définis comme dans le Chapitre 3 – Partie III – Section 1) ce qui correspond à un angle d'environ 3,5 degrés.

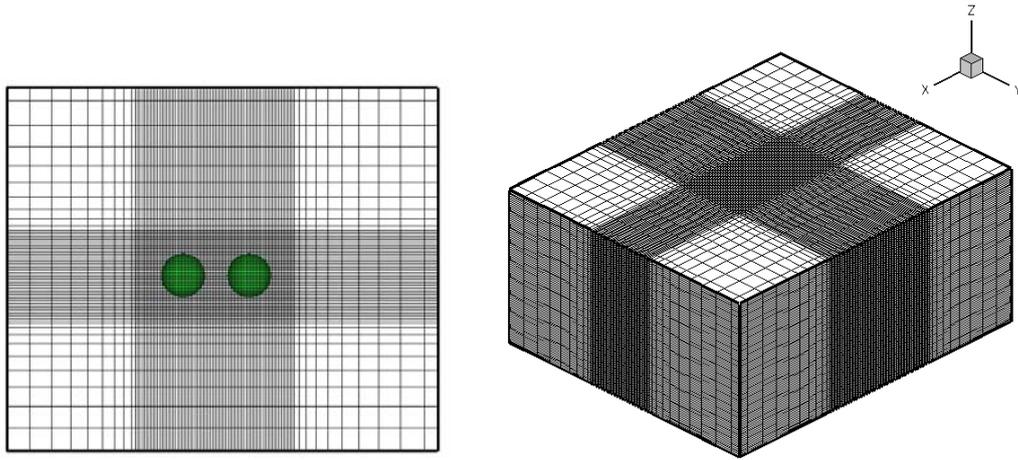


Figure 3.38: Position initiale des bulles et maillage utilisé.
A gauche : vue de dessus. A droite : domaine de calcul.

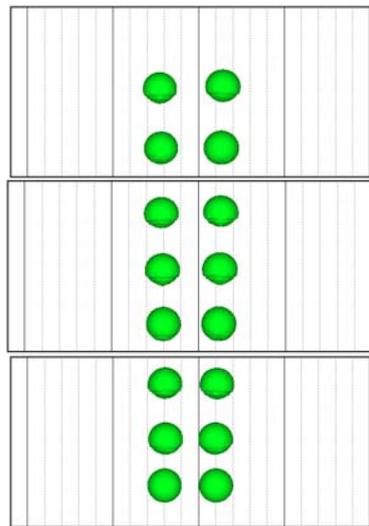


Figure 3.39: Ascension de deux bulles côte à côte pour $h=1,5d$ et $Re \approx 10$ (iso-surface $C=0,5$). Les temps correspondants sont $\tau=t(g/d)^{1/2}=0 - 2,53 - 4,81 - 6,59 - 8,62 - 10,64 - 12,41 - 14,44$.

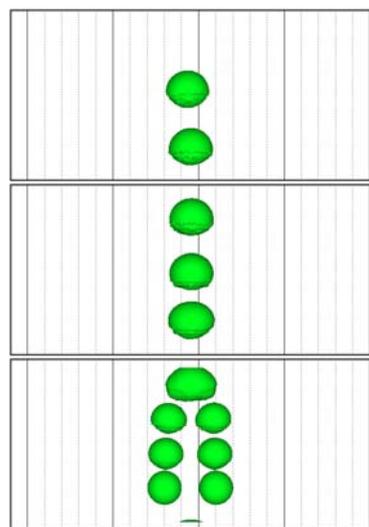


Figure 3.40: Ascension de deux bulles côte à côte pour $h=1,5d$ et $Re \approx 50$ (iso-surface $C=0,5$). Les temps correspondants sont $\tau=t(g/d)^{1/2}=0 - 1,49 - 2,48 - 3,45 - 4,45 - 5,44 - 6,68 - 7,92 - 9,42$.

La situation est très différente dans le cas n°2 (figure 3.40). Tout d'abord, les bulles se rapprochent comme attendu, puis elles coalescent après avoir parcouru une distance de trois à quatre diamètres pour former une bulle sphéroïdale légèrement aplatie dont le nombre de Reynolds vaut environ 60. Pour vérifier si la coalescence observée numériquement est en accord avec la physique, nous nous appuyons sur les travaux expérimentaux de *Duineveld 1994*. Celui-ci observe que deux bulles en ascension côte à côte et qui se rapprochent l'une de l'autre peuvent soit coalescer soit rebondir suivant les valeurs d'un nombre de Weber $We_a = \rho_1 V_a^2 d / \sigma$ basé sur leur vitesse de rapprochement. En dessous d'un nombre de Weber critique de $0,18 \pm 0,03$ les bulles coalescent, tandis qu'elles rebondissent lorsque que We_a excède cette valeur. En d'autres termes, si les bulles se rapprochent suffisamment lentement pour laisser le film liquide qui les séparent se drainer elles coalescent, sinon elles rebondissent. Nous calculons une estimation de la vitesse d'approche des bulles dans notre cas en comparant la distance inter-bulles à deux instants différents : à $\tau=0$ la distance est de 0,01m tandis qu'à $\tau=3,45$ elle est nulle. Nous en déduisons une vitesse latérale de l'ordre de 0,07m/s et un nombre de Weber de l'ordre de $5 \cdot 10^{-3}$: cette valeur est très inférieure à 0,18, nous sommes donc bien dans le régime où les bulles coalescent.

Néanmoins, on peut se demander si certains paramètres numériques ont une influence sur cette coalescence, et si oui lesquels ? Nous avons fait varier les principaux paramètres numériques (pas de temps, résolution spatiale, etc...) et deux paramètres se sont avérés jouer un rôle important dans le phénomène de coalescence : le nombre de lissages du taux de présence utilisés pour le calcul de la force capillaire (voir Chapitre 1 – Partie II – Section 2) et la résolution spatiale.

Influence du lissage du taux de présence

La simulation reportée sur la figure 3.41 est la même que celle que décrit la figure 3.40 mais avec un nombre de lissages successifs de C non plus de 16 mais de 4. Non seulement les deux bulles ne coalescent plus mais elles s'écartent l'une de l'autre ! Notons que la bulle de droite monte un peu plus rapidement que sa voisine. Ceci peut être imputé au fait que le domaine de calcul n'est pas parfaitement symétrique (les traits verticaux à proximité du domaine de calcul ne sont pas exactement à la même distance des frontières). Pourquoi le lissage de C a une telle influence ? Ce lissage a deux effets sur la force capillaire. Le premier est un filtrage des perturbations de $\nabla C / \|\nabla C\|$ intervenant dans l'intégrale $\int_{\Gamma} (\nabla C / \|\nabla C\|) \mathbf{n} d\Gamma$ (voir calcul du terme capillaire Chapitre 1 – Partie II – Section 2), c'est à dire qu'il filtre les valeurs de la courbure sur le contour de l'interface. Le second est d'étaler le gradient moyen $\overline{\nabla C}$ qui intervient en pré-facteur dans la force capillaire $F = \sigma \left[\int_{\Gamma} (\nabla C / \|\nabla C\|) \mathbf{n} d\Gamma \right] \overline{\nabla C}$, c'est-à-dire qu'il élargit la zone d'influence de cette force. A chaque lissage du taux de présence, le gradient de C est filtré mais aussi étalé dans la direction normale à l'interface : la zone sur laquelle les sources de quantité de mouvement issues de la force capillaire sont non nulles s'étale aussi et les bulles entrent en interaction d'autant plus tôt que le nombre de lissages est important. Il y a donc un compromis à trouver entre un lissage trop faible qui engendre

des fluctuations de courbure importantes et un lissage trop fort qui surestime les interactions entre les bulles.

Quels sont les moyens de s'affranchir ou en tout cas de réduire l'influence de ce lissage sur la coalescence ? Plusieurs pistes sont possibles. Tout d'abord on peut tout simplement changer la façon dont est calculée la courbure en introduisant une méthode plus précise comme par exemple le transport d'une fonction Level Set qui serait dédiée au calcul de cette courbure. On peut aussi conserver la modélisation de départ mais découpler les deux effets du lissage en utilisant un premier taux de présence C' lissé n' fois pour le calcul de la courbure et un second taux de présence C'' lissé n'' fois ($n' \neq n''$) pour le calcul de $\overline{\nabla C}$. En prenant n' grand et n'' petit, on peut penser que la courbure sera homogène et que la zone d'influence de la force capillaire sera confinée à la zone de transition. Une dernière option serait d'utiliser un filtre connu analytiquement pour lisser le taux de présence. Ceci permettrait de réaliser analytiquement les dérivations nécessaires au calcul de la normale et de la courbure sans introduire de bruit supplémentaire. Cette technique a déjà été utilisée par *Rudman 1997* et est à l'étude dans notre équipe.

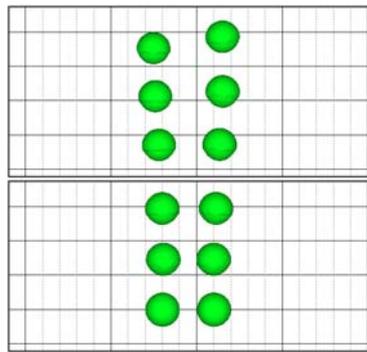


Figure 3.41: Influence du lissage de C . $h=1,5d$; $Re \approx 50$; iso-surface $C=0,5$; nombre de lissage=4. Les temps correspondant sont $\tau=t(g/d)^{1/2}=0 - 2,24 - 3,98 - 5,47 - 7,20 - 8,94$.

Influence de la résolution spatiale dans le film liquide

L'autre paramètre numérique jouant un rôle dans le phénomène de coalescence est la résolution spatiale notamment dans le film qui sépare les deux bulles. Juste avant la coalescence, l'épaisseur du film liquide est de l'ordre de la taille de la cellule de calcul. Il est donc illusoire de penser décrire finement l'hydrodynamique du drainage de ce film. Nous avons simulé les interactions de deux cylindres en ascension l'un à côté de l'autre pour différentes résolutions spatiales. Les simulations sont bidimensionnelles planes pour économiser les ressources de calcul mais ceci n'enlève rien à la généralité du problème. Les propriétés du système simulé sont les suivantes :

Masse volumique du liquide ρ_l	1000 kg/m ³
Masse volumique dans la bulle ρ_g	20 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	0,2356 kg/(m.s)
Viscosité dynamique dans la bulle μ_g	0,2356.10 ⁻² kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	39,24 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre de la bulle d	0,02 m
Nombre de Morton M	5.10 ⁻¹⁰
Nombre de Bond Bo	0,1
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	50
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	100
$S = h/(d/2)$	3

Les maillages utilisés sont cartésiens et réguliers. Ils comportent respectivement 30×35, 90×105 et 120×140 cellules de calcul. Les conditions aux limites sont des symétries sur les frontières verticales et sont périodiques sur les frontières horizontales. Il y a respectivement 5, 15 et 20 cellules de calcul dans le film liquide pour les trois maillages. Il n'y a qu'une bulle dans le domaine de calcul, mais elle est située près d'une frontière symétrique et interagit donc avec son image. Les figures 3.42-44 montrent l'évolution de la paire de cylindres au cours de son ascension pour les trois résolutions (le domaine de calcul a été dupliqué symétriquement pour mieux observer la coalescence). Les trois simulations sont identiques excepté en ce qui concerne la résolution spatiale. Dans le cas du maillage grossier, les cylindres ont déjà coalescé aux temps $\tau < 0,89$ tandis que dans le cas du maillage intermédiaire la coalescence survient aux temps $2,66 < \tau < 3,64$. Enfin aucune coalescence n'est observée dans le cas du maillage le plus fin. La simulation de ce cas a été poussée jusqu'au temps $\tau = 9$ et aucune coalescence n'est observée. Il est donc clair que la résolution spatiale influence dramatiquement le phénomène de coalescence numérique et il faut rester prudent quant à la façon d'interpréter ce phénomène avec toutes les méthodes utilisant un maillage fixe.

Au regard des différents cas abordés dans cette partie, notre outil numérique semble reproduire correctement la physique d'écoulements diphasiques « simples ». Le modèle à deux viscosités permet sur les cas présentés de mieux prendre en compte les effets visqueux aux interfaces. La dynamique des bulles est bien reproduite par la méthode numérique, même pour des nombres de Reynolds importants. Enfin les phénomènes complexes d'interaction de bulles comme la coalescence sont bien pris en compte mais restent sensibles aux paramètres numériques (nombre de lissages du taux de présence, résolution spatiale).

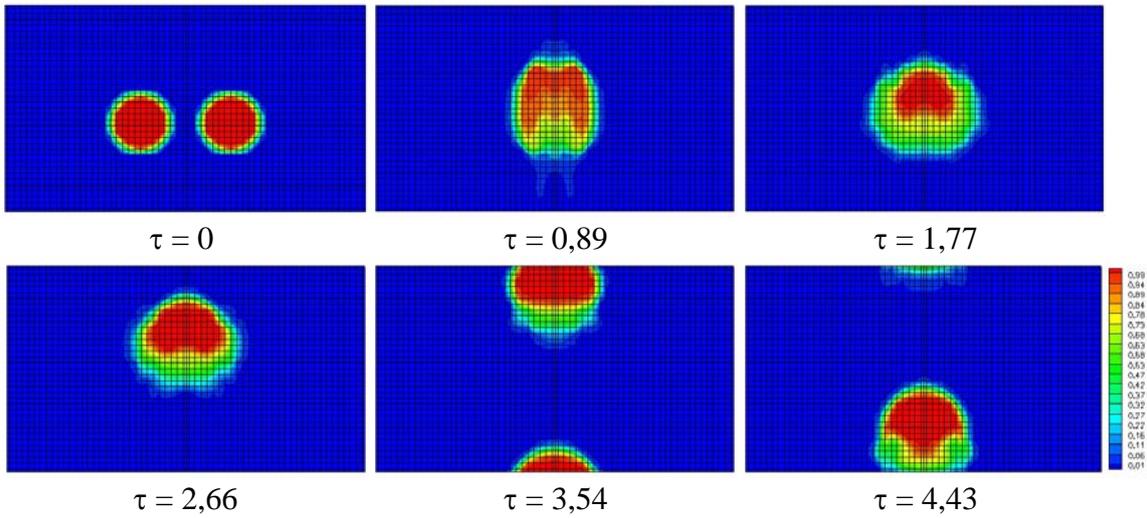


Figure 3.42: Influence de la résolution spatiale dans le film liquide. Maillage 30×35 . Nombre initial de mailles dans le film $n_{film} = 5$; $h = 1,5d$; $Re \approx 50$; $\tau = t(g/d)^{1/2}$.

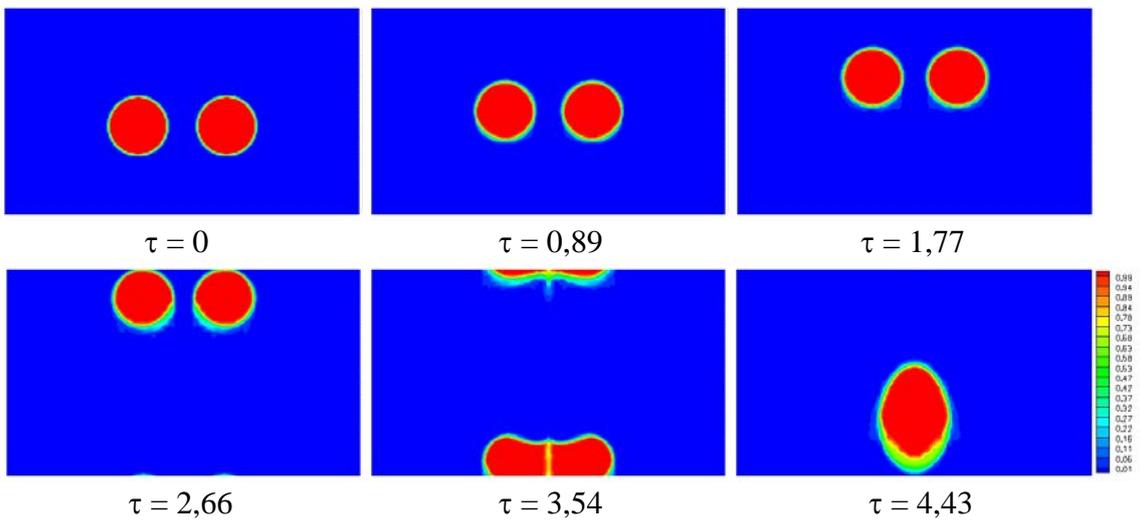


Figure 3.43: Identique à la figure 3.42 avec un maillage 90×105 et $n_{film} = 15$.

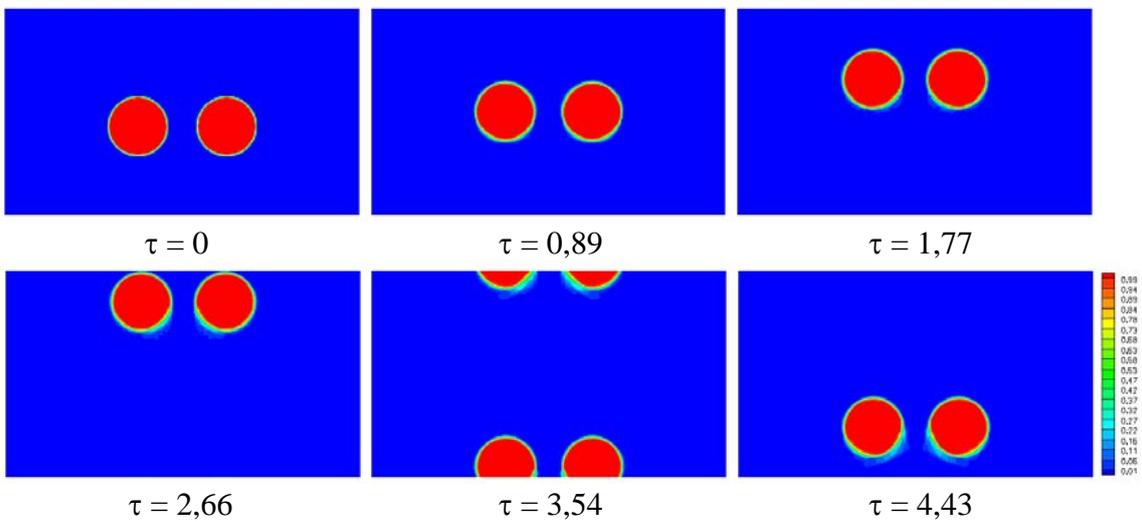


Figure 3.44: Identique à la figure 3.42 avec un maillage 120×140 et $n_{film} = 20$.

Chapitre 4

Quelques écoulements à bulles et à gouttes : des petits aux grands nombres de Reynolds

Ce chapitre est divisé en trois parties correspondant à des phénomènes intervenant à des échelles différentes. Dans la première, nous examinons le mélange dans des gouttes s'écoulant en micro-canal et pour lesquelles le nombre de Reynolds est très inférieur à l'unité. Les échelles sont très petites (de l'ordre de quelques dizaines de micromètres) et le phénomène est principalement piloté par les effets capillaires et visqueux. Dans les deuxième et troisième parties, les échelles sont plus grandes (de quelques millimètres à quelques centimètres) et les effets inertiels entrent en jeu. La deuxième partie est consacrée à l'étude d'une bulle isolée montant sous l'effet de la pesanteur à travers une gamme de paramètres couvrant la plupart des couples de fluides existants. La troisième partie s'intéresse à l'évolution d'une suspension de bulles dans des écoulements où le nombre de Reynolds varie de quelques dizaines à quelques centaines.

I. Microfluidique diphasique

1) *La problématique*

De nombreuses opérations en Génie des Procédés ont besoin de mettre en contact plusieurs fluides, soit directement pour favoriser la réaction chimique ou le transfert de matière, soit indirectement pour favoriser le transfert de chaleur. Ces échanges ont lieu aux interfaces entre ces fluides. Ils sont donc d'autant plus importants que surface d'échange ($S_{\text{transferts}}$) est grande par unité de volume considérée (V_{fluides}). L'objectif est donc d'avoir un rapport $S_{\text{transferts}} / V_{\text{fluides}}$ aussi grand que possible. Soit L l'échelle de longueur à laquelle les échanges interviennent. Le terme $S_{\text{transferts}}$ étant proportionnel à L^2 tandis que le terme V_{fluides} étant proportionnel à L^3 , le rapport $S_{\text{transferts}} / V_{\text{fluides}}$ est donc proportionnel à $1/L$. L'intérêt de travailler à des dimensions petites est clair : plus L est petit, plus le rapport $S_{\text{transferts}} / V_{\text{fluides}}$ est grand. Par ailleurs, pour certaines applications (notamment la mesure de données physico-chimiques sur des produits coûteux ou des systèmes dangereux), il est intéressant d'avoir des rétentions et des en-cours de produits les plus faibles possibles. C'est pourquoi de nombreux travaux se sont tournés ces dernières décennies vers les écoulements diphasiques évoluant dans des conduites millimétriques et plus récemment micrométriques. Pour une description complète des applications et des problématiques concernant la microfluidique, nous renvoyons le lecteur à l'article de synthèse de *Stone et al. 2004*.

A ces échelles, les effets capillaires et visqueux sont prédominants et les écoulements sont généralement laminaires. Le mélange des différents produits est alors plus difficile à réaliser que dans les écoulements turbulents. De nombreux travaux expérimentaux sont dédiés à l'étude des écoulements mono et diphasiques dans les milli-canaux et les micro-canaux. Cependant les expériences sont confrontées à certaines limitations (*Stone et al. 2004*). En effet à ces échelles, la moindre erreur dans les mesures conduit à des résultats très différents. Comment au moment d'interpréter les résultats, faire la distinction entre ce qui est physique et ce qui relève de l'erreur de

mesure ? C'est notamment pour répondre à cette question que la simulation numérique est nécessaire. Contrairement aux travaux expérimentaux, les travaux numériques concernant la simulation d'écoulements diphasiques dans les micro-canaux sont peu nombreux. *Holdych et al. 2004* étudient la stabilité d'un écoulement annulaire gaz-liquide par simulation de type Lattice Boltzmann dans un micro-canal bidimensionnel, *Ghidrsa et al. 2004* simulent de façon tridimensionnelle la dynamique d'un train de bulles dans un canal millimétrique par une méthode VOF. Enfin *Muradoglu & Stone 2005* utilisent une méthode de type Front Tracking pour simuler le mélange convectif dans une goutte bidimensionnelle qui se déplace dans un canal en forme de serpent.

A titre de remarque, on peut se demander si à des échelles aussi petites, l'approche de la mécanique des milieux continus reste valable. Rappelons que cette approche est valide tant que le nombre de Knüdsen est très petit devant un. Ce nombre est défini par le rapport d'une longueur λ caractérisant les phénomènes microscopiques et d'une longueur L caractérisant les phénomènes macroscopiques. Dans le cas d'un écoulement diphasique dont l'un des fluides est un gaz (l'air) dans un canal de 10 micromètres de diamètre, on peut prendre λ égal au libre parcours moyen de l'air ($\lambda \approx 1,8 \cdot 10^{-7}$ m) et on choisit $L = 10 \cdot 10^{-6}$ m. Il vient un nombre de Knüdsen de 0,018 qui est très inférieur à l'unité. Nous sommes donc bien dans le cadre de validité de l'approche des milieux continus. Celle-ci devient plus discutable pour les écoulements de gaz dans des canaux dont les dimensions sont inférieures à quelques dizaines de nanomètres (*Stone et al. 2004*). Par la suite nous désignerons par « micro-canal » un canal dont le diamètre hydraulique est inférieur au millimètre.

Un des objectifs majeurs en chimie fine ou pharmaceutique est d'améliorer la phase d'acquisition des données physico-chimiques, notamment celles permettant d'élaborer des modèles stœchiométriques et des modèles de cinétiques chimiques et de transferts. La connaissance de ces modèles permet ensuite de définir des conditions de mise en œuvre et de conduite optimale des appareils industriels. Une des applications les plus prometteuses des écoulements diphasiques en microfluidique est l'utilisation de gouttes comme « micro-réacteurs chimiques individuels » (*Song et al. 2003*). Les avantages à produire la réaction chimique dans des gouttes sont multiples : les produits sont isolés, transportés et mélangés efficacement par les effets diffusifs et convectifs qui ont lieu au sein de la goutte. De plus, les quantités mises en jeu sont très faibles et très bien contrôlées. Ces caractéristiques sont particulièrement intéressantes pour l'industrie de chimie fine qui manipule des produits chers et parfois toxiques. Il est alors possible d'étudier finement la cinétique des réactions car mesurer le temps de réaction revient à mesurer la position de la goutte ce qui est très facile si la vitesse de celle-ci est constante et connue. Pour optimiser ce genre d'application il est nécessaire de comprendre la formation, la coalescence, le transport, le mélange interne ou encore la rupture des gouttes dans les micro-canaux. Dans le cadre de sa thèse, Flavie Sarrazin (Thèse LGC/Rhodia, *Sarrazin et al. 2005*) étudie le mélange d'un colorant au sein de gouttes se déplaçant dans des micro-canaux (voir la figure 4.1). Elle observe des zones internes dans lesquelles le mélange se fait mal, notamment à l'avant et à l'arrière de la goutte. Pourquoi observe-t-on ces zones « mortes » ? Sont-elles une conséquence de l'hydrodynamique au sein de la goutte ? Si oui, quels sont les paramètres qui contrôlent le phénomène ? Comment alors se débarrasser de ces zones ?

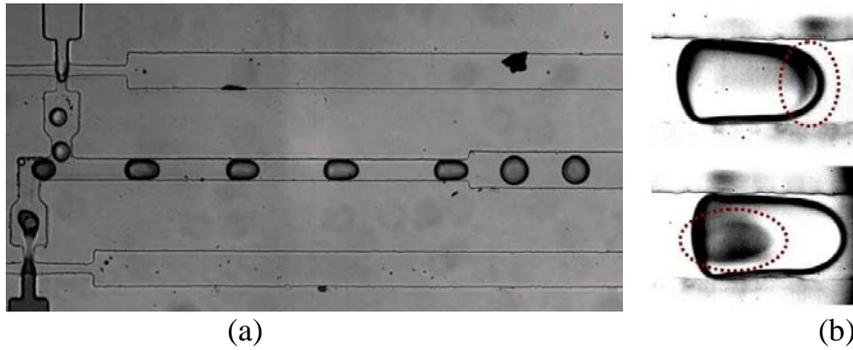


Figure 4.1: Mélange au sein de gouttes d'eau dans un micro-canal rempli d'huile.
 (a) Vue globale du dispositif. La section du canal central est $50\mu\text{m} \times 60\mu\text{m}$. (b) Zones mortes.
 (Clichés F. Sarrazin)

2) Simulation d'un train de gouttes dans un micro-canal

L'objectif que nous avons poursuivi sur ce thème est de simuler la dynamique d'un train de gouttes en mouvement dans un canal micrométrique puis de comparer nos résultats avec les expériences de Flavie Sarrazin. Nous étudions parallèlement le mélange au sein de la goutte en introduisant un traceur passif et en observant la dilution du colorant au cours du temps.

Soit un canal de section rectangulaire de $50\mu\text{m}$ de hauteur, de $60\mu\text{m}$ de largeur et de quelques centimètres de longueur. Le canal est rempli d'huile de silicone de densité $\rho_h=950 \text{ kg/m}^3$ et de viscosité $\mu_h=0,02 \text{ kg/(ms)}$. Dans ce canal circule un train de gouttes d'eau ayant pour densité $\rho_g=1000 \text{ kg/m}^3$ et pour viscosité $\mu_g=0,001 \text{ kg/(ms)}$. Le volume de ces gouttes est $V_g \approx 3 \cdot 10^{-13} \text{ m}^3$, et la tension de surface est $\sigma=0,01 \text{ N/m}$. Les vitesses et les débits mesurés expérimentalement sont recensés dans le tableau ci-dessous :

Vitesse de la phase continue U_h	0,037 m/s
Débit volumique de la phase continue Q_h	$11 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3/\text{s}$
Vitesse de la phase discrète U_g	0,05 à 0,1 m/s
Débit volumique de la phase continue Q_g	$2,8 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3/\text{s}$

Quels sont les effets dominants dans cet écoulement ? Pour répondre à cette question, calculons le nombre de Reynolds basé sur le diamètre équivalent des gouttes D , sa vitesse de glissement V et les propriétés de la phase continue. En prenant $D \approx 80\mu\text{m}$, $V \approx 1-5 \text{ cm/s}$, il vient $Re = \rho_h V D / \mu_h = 0,04-0,19$. De plus les rapports de densité et de viscosité sont $\rho_h / \rho_g = 0,95$ et $\mu_h / \mu_g = 20$ respectivement, le nombre capillaire est $Ca = \mu_h V / \sigma = 0,02-0,1$ (le nombre de Weber est $We = \rho_h V^2 D / \sigma = 8 \cdot 10^{-4} - 2 \cdot 10^{-2}$) et le nombre de Bond vaut $Bo = |\rho_g - \rho_h| g D^2 / \sigma = 3 \cdot 10^{-4}$. Les effets d'inertie et de flottabilité sont donc négligeables devant les effets visqueux et capillaires. Nous verrons un peu plus loin que la prédominance des effets capillaires aura des répercussions sur le pas de temps numérique.

Deux simulations sont réalisées, une première bidimensionnelle plane, une seconde tridimensionnelle. Dans les deux cas nous supposons que la gravité a un effet négligeable sur l'écoulement et nous exploitons les symétries de l'écoulement : seule la moitié (respectivement le quart) de la goutte est pris en compte dans la simulation bidimensionnelle (respectivement tridimensionnelle). De plus la configuration du train de gouttes peut se ramener à l'étude d'une seule goutte dans un domaine de calcul dont les conditions aux limites sont périodiques suivant la direction de l'écoulement. La longueur du domaine définit alors la fréquence d'injection des gouttes. Les dimensions des domaines de calcul et les maillages sont présentés sur la figure 4.2. Les conditions aux limites sont périodiques sur les frontières amont et aval, correspondent à des symétries sur les plans en contact avec la goutte et à des parois sur les autres plans. Le maillage est raffiné près des parois afin de décrire correctement l'hydrodynamique du film liquide qui sépare la goutte des parois (voir la figure 4.3). Il y a environ 10 cellules de calcul initialement dans le film et la taille de la cellule la plus petite est d'environ $0,3\mu\text{m}$. Le pas d'espace suivant la direction de déplacement de la goutte est régulier, il vaut $1,67\mu\text{m}$ pour la simulation 2D et $1,5\mu\text{m}$ pour la simulation 3D. Les dimensions initiales de la goutte sont données sur la figure 4.4.

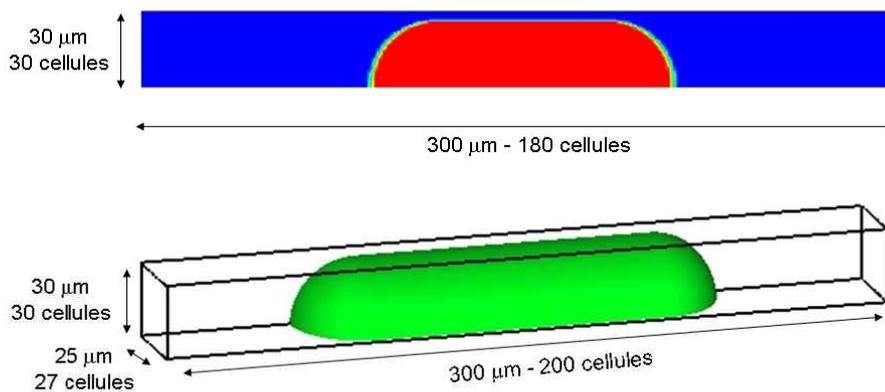


Figure 4.2: Les domaines de calcul et les conditions initiales. En haut : simulation bidimensionnelle. En bas : simulation tridimensionnelle.

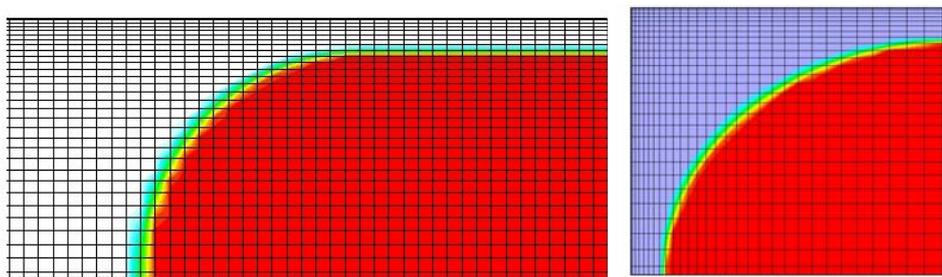


Figure 4.3: Maillages utilisés. A gauche : simulation 2D (seule une partie du maillage est représentée). A droite : simulation 3D (plan transversal à la direction de l'écoulement).

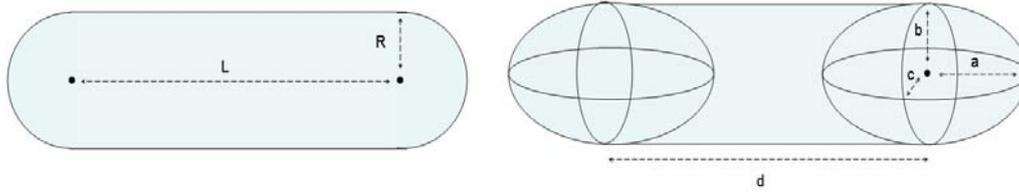


Figure 4.4: Forme initiale de la goutte. A gauche : cas 2D - $L=70\mu\text{m}$ - $R=25\mu\text{m}$. A droite : cas 3D - $a=27\mu\text{m}$ - $b=27\mu\text{m}$ - $c=22\mu\text{m}$ - $d=122\mu\text{m}$.

Dans les expériences les paramètres de contrôle sont les débits des deux phases. Dans les simulations, les gouttes sont déjà présentes dans le canal et le mouvement se fait en imposant un gradient de pression constant. Il faut donc estimer la valeur de ce gradient de pression. On calcule pour cela la perte de charge dans le canal en supposant qu'il n'y a que de l'huile (phase porteuse seule). Le coefficient de perte de charge λ dans un canal est,

$$\lambda = \frac{\Delta P}{\frac{1}{2}\rho_h U_h^2} \cdot \frac{H}{L} = \frac{64}{\text{Re}_h} \quad \text{avec} \quad \text{Re}_h = \frac{\rho_h U_h H}{\mu_h} \tag{4.1}$$

où L et H sont respectivement la longueur et la hauteur du canal. Nous choisissons $H=60\mu\text{m}$, ce qui donne un gradient de pression $dP/dx=\Delta P/L=6,58.10^6$ Pa/m.

Nous rappelons qu'à chaque contribution intervenant dans les équations de Navier-Stokes est associée un critère de stabilité sur le pas de temps numérique. Le tableau 4.1 donne la valeur des pas de temps correspondant aux différentes contributions dans le cas de la goutte en mouvement dans un micro-canal : le pas de temps le plus restrictif est clairement le pas de temps capillaire. On peut remarquer que sa valeur est très faible (les pas de temps habituels varient entre 10^{-5} et 10^{-3} s). Il faut donc un nombre important de pas de temps pour que le train de goutte se déplace de façon significative, ce qui peut représenter un temps de calcul important notamment pour la simulation tridimensionnelle.

		$\Delta x = 0,3 \mu\text{m}$ $U = 0,05 \text{ m/s}$
		Δt
gravité	$\Delta t_g < \sqrt{\frac{\Delta x}{g}}$	$1,7.10^{-5} \text{ s}$
advection	$\Delta t_a < \frac{\Delta x}{U}$	6.10^{-6} s
viscosité	$\Delta t_v < \frac{\Delta x^2}{\nu}$ schéma semi-implicite	∞
capillarité	$\Delta t_c < \sqrt{\frac{(\rho_1 + \rho_2)\Delta x^3}{8\sigma}}$	$2,6.10^{-8} \text{ s}$

Tableau 4.1: Contraintes sur le pas de temps numérique.

La figure 4.5 présente l'évolution du train de goutte issue de la simulation bidimensionnelle. Le pas de temps de la simulation est 1.10^{-8} s, le nombre de pas de temps est de 400000 pour un temps physique simulé de 4.10^{-3} s. Le temps de calcul est d'environ 20h sur un PC monoprocesseur Intel(R) Pentium(R) 4 CPU 3.00 GHz avec 2 Go de RAM. La goutte prend très rapidement une forme d'ogive avec un nez profilé et un culot aplati. Notons un léger étalement de la zone de transition à l'arrière de la goutte. Cette zone correspond aux points de l'écoulement où l'étirement est maximum, de plus cet étirement est d'autant plus important que les dimensions du canal sont faibles (*Stone et al. 2004*). Notons aussi que l'épaisseur du film liquide semble importante en comparaison avec la photo de la figure 4.1. Ceci vient du caractère bidimensionnel de la simulation qui empêche le fluide de passer sur les côtés de la goutte.

Les figures 4.6 et 4.7 présentent l'évolution de la goutte dans le cas de la simulation tridimensionnelle. Le pas de temps est de $0,8.10^{-8}$ s, le nombre de pas de temps de 275000 pour un temps physique simulé de $2,2.10^{-3}$ s et le temps de calcul est de 49 jours...

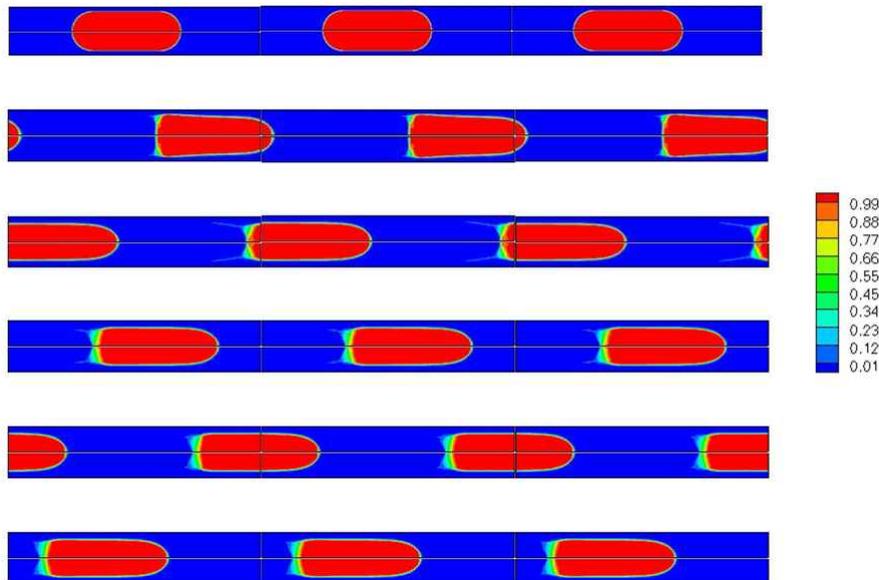


Figure 4.5: Train de gouttes calculé par la simulation bidimensionnelle. Visualisation du taux de présence de la phase dispersée. Les traits noirs correspondent aux frontières du domaine de calcul. Les temps sont de haut en bas $\tau = t/(\rho_h D^2/\mu_h) = 0 - 1,05 - 2,10 - 4,20 - 6,30 - 8,40$.

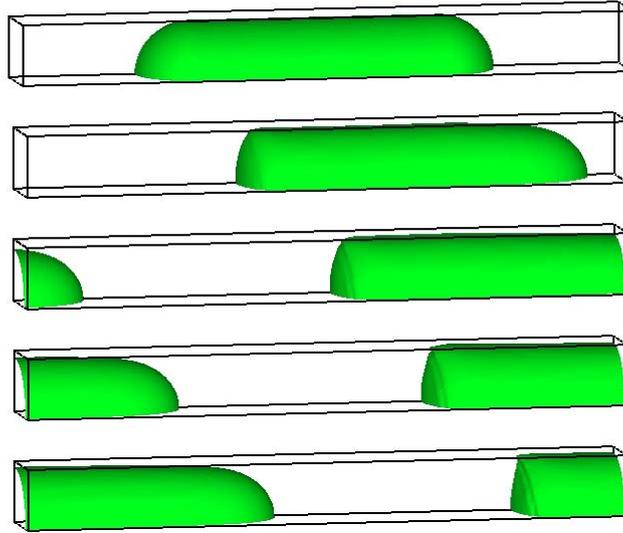


Figure 4.6: Train de gouttes calculé par la simulation tridimensionnelle. Visualisation de l'iso-surface $C=0,5$. Vue en perspective. Le temps entre chaque cliché est $\Delta\tau = \Delta t / (\rho_h D^2 / \mu_h) = 1,81$.

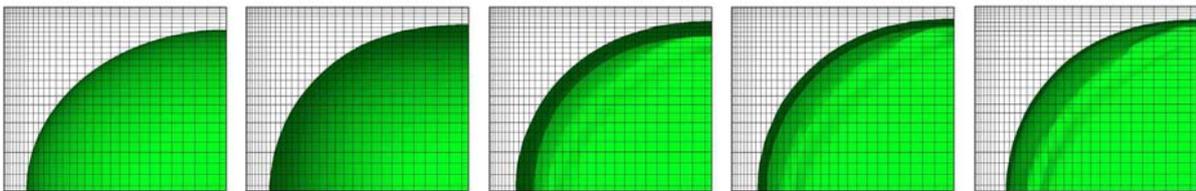


Figure 4.7: Identique à la figure 4.6 en vue de face.

Les observations sont les mêmes que pour la simulation bidimensionnelle à la différence que les films de liquide sont plus fins car cette fois-ci le liquide peut passer sur les côtés du canal. Nous pouvons observer l'établissement de ces films à l'aide de la coupe de la figure 4.7.

Evolution d'un colorant dans la goutte

Nous introduisons maintenant un colorant dans la goutte. L'objectif est d'observer le mélange par convection au sein de la goutte et éventuellement de détecter des régions où ce mélange ne se fait pas. En pratique nous résolvons une équation supplémentaire de transport pour le colorant de la même façon que pour la fraction volumique (via l'équation 1.2). Le colorant (ou traceur) n'a aucune influence sur l'écoulement et nous supposons la diffusion moléculaire négligeable devant la convection ; la diffusion éventuellement observée est donc d'origine purement numérique. Les simulations présentées sont bidimensionnelles planes et nous considérons deux initialisations de la concentration en colorant comme illustré sur la figure 4.8. Les fluides sont initialement au repos.



Figure 4.8: Les deux configurations d'injection du colorant. (a) colorant introduit près de l'axe de la goutte. (b) colorant introduit dans la moitié avant de la goutte.

Les figures 4.9 et 4.10 présentent l'évolution du colorant dans les cas (a) et (b). Dans les deux cas nous observons une mise en mouvement du fluide au sein de la goutte, et plus précisément l'apparition de deux grandes cellules de recirculation contrarotatives séparées par le plan de symétrie. Près de l'interface liquide-liquide le fluide va vers le culot de la goutte tandis qu'au centre de la goutte il se déplace vers le nez. Nous pouvons remarquer la formation de zones où le colorant stagne notamment au nez de la goutte (figures 4.9.e et 4.10.d) et au culot de la goutte (figures 4.9.b et 4.10.e). La présence de ces zones dites mortes est en accord avec les observations expérimentales de Flavie Sarrazin. L'origine de ces zones mortes devient claire au regard de la figure 4.11 où sont tracées les lignes de courant dans le référentiel de la goutte. La figure de droite est un zoom du nez de la goutte : il y a clairement une zone de recirculation dans le nez de la goutte. Cette zone de n'est pas « visible » dans le culot de la goutte car l'étalement de l'interface dans cette région homogénéise le champ de vitesse. Il est cependant clair au regard des figures 4.9 et 4.10 que cette zone est bien présente. La simulation numérique permet donc ici de mettre en évidence l'effet de l'hydrodynamique du liquide au sein de la goutte sur le mélange des réactifs. Il serait par la suite intéressant de voir si l'existence de ces zones de recirculation évolue en fonction de la longueur de la goutte, de la taille du domaine, du confinement de la goutte dans le canal et des propriétés des fluides.

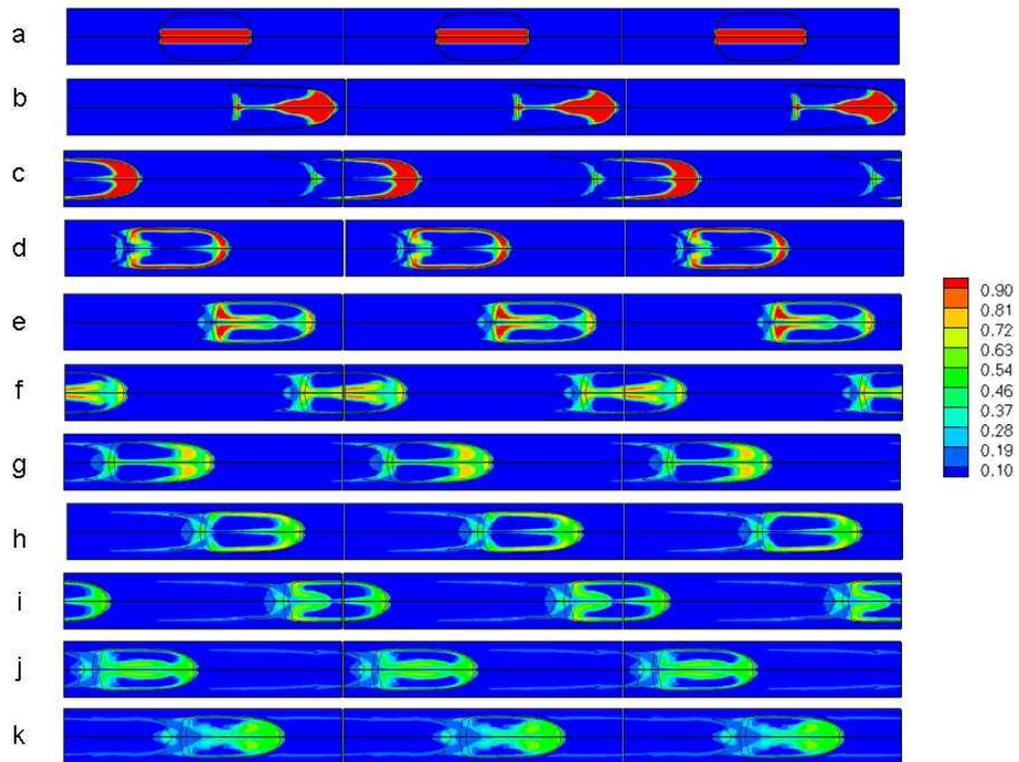


Figure 4.9: Evolution du colorant au sein de la goutte (cas a). Simulation bidimensionnelle. Le temps entre chaque cliché est $\Delta\tau=\Delta t/(\rho_h D^2/\mu_h)=1,97$.

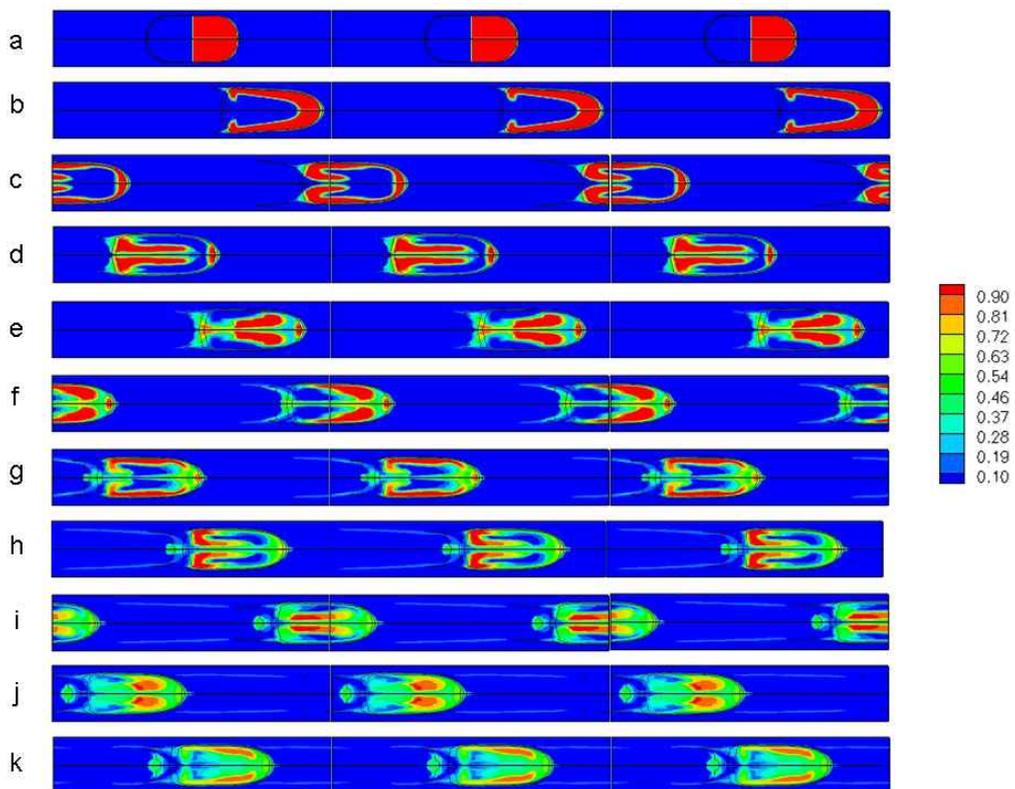


Figure 4.10: Identique à la figure 4.9 (cas b).

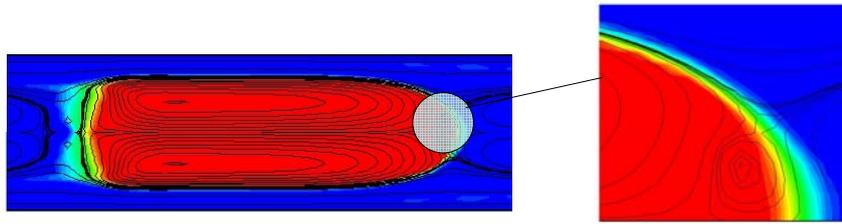


Figure 4.11: Lignes de courant dans le référentiel de la goutte. A droite : zoom sur la zone de recirculation dans le nez de la goutte.

3) Comparaison avec les expériences

Des expériences analogues aux simulations ci-dessus ont été réalisées au Laboratoire de Génie Chimique de Toulouse (LGC) par Flavie Sarrazin qui a effectué d'une part des visualisations par caméra rapide pour déterminer la forme et la vitesse des gouttes, et d'autre part des mesures par imagerie de particules (micro-PIV) pour déterminer le champ de vitesse local au sein des gouttes.

Forme des gouttes

La figure 4.12 compare les formes expérimentale et calculée des gouttes au sein du micro-canal. Les formes d'ogive observées et calculées sont en bon accord qualitatif. Notons toutefois que les gouttes simulées sont plus longues que celles qui sont observées expérimentalement. Dans le cas de la simulation bidimensionnelle, ceci est dû au fait que le liquide porteur doit passer entre les parois et la goutte : le film liquide est donc plus épais et les gouttes plus allongées. On observe aussi que l'espacement entre les gouttes est plus grand dans l'expérience que dans les simulations. Il est probable que le volume des gouttes et la fréquence d'injection de la figure 4.12a ne correspondent pas exactement à ceux imposés dans nos simulations même si l'ordre de grandeur est le même.

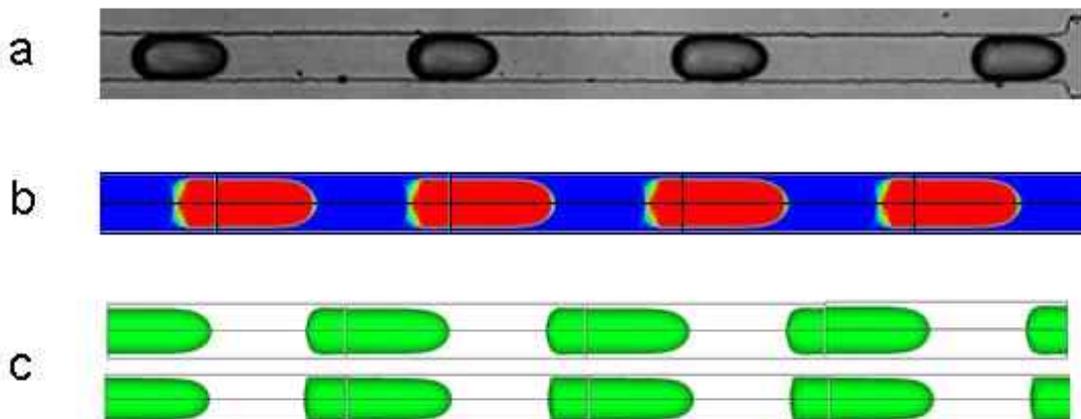


Figure 4.12: Comparaison de la forme des gouttes dans le canal micrométrique. (a) Expériences. (b) Simulation 2D. (c) Simulation 3D (vue de haut et de profil).

Vitesse moyenne des gouttes et débit associé

La figure 4.13 montre l'évolution de la vitesse des gouttes calculée dans les simulations bi- et tridimensionnelles. Nous pouvons vérifier que le train de gouttes atteint une vitesse stationnaire en un temps de l'ordre du temps visqueux $\tau = \rho_h D^2 / \mu_h \approx 3.10^{-4}$ s. Seule la vitesse calculée par la simulation tridimensionnelle est pertinente pour la comparaison directe avec les résultats expérimentaux. En effet, l'absence de parois latérales dans la simulation bidimensionnelle modifie la vitesse de déplacement des gouttes. Calculons les débits volumiques de chaque phase Q_h et Q_g définis par :

$$Q_g = \frac{1}{L} \int_0^L \left(\int_S C \mathbf{U} \cdot \mathbf{N} dS \right) dx \quad \text{et} \quad Q_h = \frac{1}{L} \int_0^L \left(\int_S (1-C) \mathbf{U} \cdot \mathbf{N} dS \right) dx \quad (4.2)$$

où L est la longueur du domaine de calcul, S la section du canal, C la fraction volumique de la phase dispersée, \mathbf{U} la vitesse locale du fluide, \mathbf{N} la normale unitaire de l'élément de surface dS et x la direction principale de l'écoulement. Le tableau 4.2 compare les vitesses et les débits simulés et mesurés dans chaque phase. Rappelons que toutes ces grandeurs sont calculées à posteriori dans la simulation et que nous avons imposé un gradient de pression constant. La comparaison des vitesses est tout à fait satisfaisante et les valeurs des débits sont du même ordre de grandeur. La différence observée entre les débits expérimentaux et numériques vient probablement du fait que l'espacement des gouttes est beaucoup moins grand dans les simulations que dans les expériences, ce qui conduit à une surestimation du débit de la phase dispersée (voir la définition 4.2). Rappelons aussi que le gradient de pression imposé dans nos simulations est issu d'un calcul ne tenant compte que de la phase porteuse. Or, il est fort probable que le gradient de pression réel soit différent à cause de la présence des gouttes qui modifient la perte de charge.

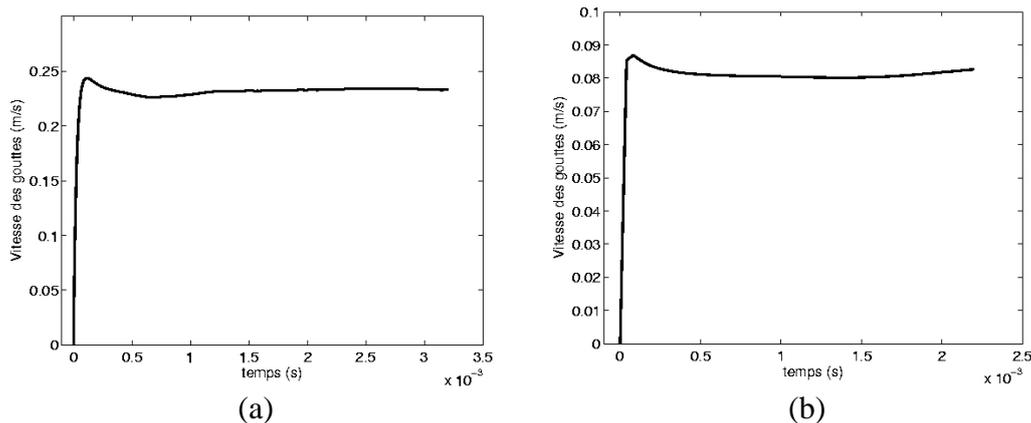


Figure 4.13: Evolution de la vitesse des gouttes.
(a) simulation 2D. (b) simulation 3D.

	simulation	expérience
U_h (m/s)	0.035	0.037
Q_h (m ³ /s)	$7.2 \cdot 10^{-11}$	$11 \cdot 10^{-11}$
U_g (m/s)	0.08	0.05 à 0.1
Q_g (m ³ /s)	$7.6 \cdot 10^{-11}$	$2.8 \cdot 10^{-11}$

Tableau 4.2: Comparaison des grandeurs moyennes globales de l'écoulement (l'indice h désigne l'huile, l'indice g la goutte).

Profils de vitesse dans la goutte

La technique de micro-PIV permet de déterminer expérimentalement le champ de vitesse instantané dans un micro-canal avec une résolution de quelques microns (*Santiago et al. 1998*). Il est alors possible de comparer finement la distribution de vitesse locale dans la goutte avec celle fournie par les simulations. La figure 4.14 présente le profil de vitesse longitudinale simulé et mesuré le long de la goutte dans deux plans horizontaux du canal, l'un correspondant au plan de symétrie horizontal, l'autre situé à $10\mu\text{m}$ au dessus. On note que l'évolution de la vitesse simulée est très similaire au profil mesuré tant du point de vue qualitatif que quantitatif. On remarque cependant un minimum local de la vitesse simulée dans le culot de la goutte qui ne se retrouve pas sur le profil expérimental. Cette différence est peut-être due soit à une recirculation non détectée par la micro-PIV, soit à l'étalement de la zone de transition numérique qui altère la résolution du champ de vitesse dans cette région de fort étirement. La figure 4.15 compare le profil de vitesse sur la largeur de la goutte au niveau du plan horizontal médian du canal et à différentes distances du nez. On peut noter d'une part que le profil transversal varie très peu avec la position par rapport au nez de la goutte et d'autre part que les résultats sont en excellent accord avec l'expérience. Examinons pour finir la structure locale de l'écoulement à la fois dans la goutte et dans la phase continue.

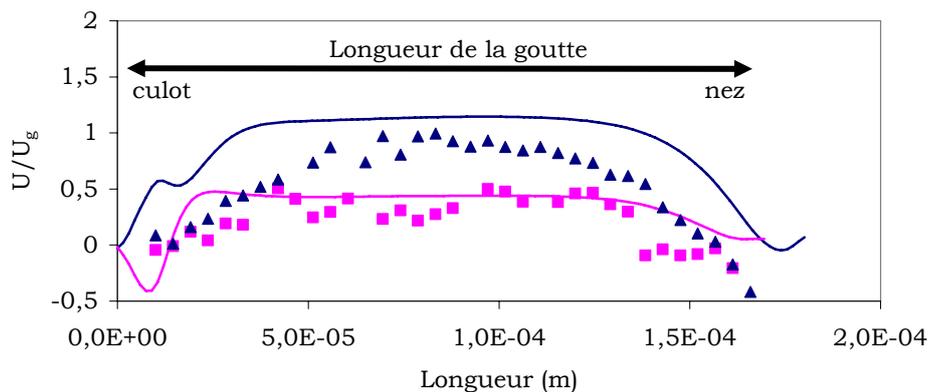


Figure 4.14: Profil de vitesse longitudinale le long de la goutte (dans le plan de symétrie vertical). (▲) micro-PIV dans le plan de symétrie horizontal ; (■) micro-PIV à $10\mu\text{m}$ au dessus de ce plan ; (—) résultats des simulations. La vitesse est adimensionnée par la vitesse de la goutte.

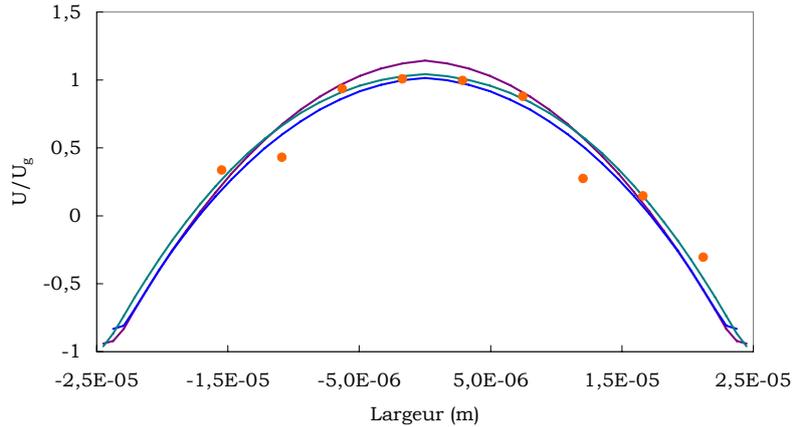


Figure 4.15: Profil de vitesse dans la largeur de la goutte (plan de symétrie horizontal). (—) profils simulés à différentes distances du nez de la goutte (1/4–1/2–3/4 de la longueur totale de la goutte) ; (●) micro-PIV à mi-longueur de la goutte. La vitesse est adimensionnée par la vitesse de la goutte ; les parois sont situées à l'abscisse $\pm 25 \mu\text{m}$.

Champ de vitesse instantané dans la goutte et le liquide

La figure 4.16 montre la structure du champ de vitesse dans le référentiel de la goutte. La figure 4.16a permet d'observer la forme circulaire légèrement aplatie de la section droite de la goutte (la section du canal est de $60 \mu\text{m} \times 50 \mu\text{m}$). De plus nous pouvons remarquer que l'épaisseur du film liquide est environ deux fois plus faible au niveau des parois supérieure et inférieure qu'au niveau des parois avant et arrière (les épaisseurs du film sont respectivement de $4,8 \mu\text{m}$ et $2,4 \mu\text{m}$). Ceci est en accord avec les effets capillaires qui ont tendance à ramener la goutte vers sa forme sphérique. Ces effets capillaires sont aussi à l'origine du sens de la recirculation dans la section droite de la goutte : l'interface pousse le liquide externe à proximité des parois horizontales tandis qu'il le tire à proximité des parois verticales. On peut donc penser que ces recirculations seront d'autant plus importantes que la section du canal sera aplatie, que le confinement de la goutte sera grand et que les effets capillaires seront importants. La figure 4.16b montre les zones de recirculation déjà observées avec le colorant dans la section précédente. Nous retrouvons l'orientation des vecteurs vitesses dirigés vers le nez de la goutte sur le plan médian vertical et vers le culot près de l'interface (la zone centrale est ici beaucoup plus large que les zones latérales). Cette dynamique interne prend naissance au niveau de l'interface (quasi plane) entre la goutte et le film de liquide. Par continuité des contraintes visqueuses à l'interface, le film d'huile plus visqueux entraîne l'eau de la goutte, moins visqueuse.

La figure 4.17 compare les champs de vitesse instantanés issus d'une part de la simulation numérique, d'autre part des mesures de micro-PIV. Le référentiel choisi est celui de la goutte. Trois plan horizontaux sont présentés, le premier correspondant au plan médian du canal, le dernier au plan situé à une distance de $6 \mu\text{m}$ de la paroi supérieure. On note clairement la présence des zones de recirculation dans les deux cas, avec un maximum de vitesse au centre de la goutte. On peut aussi remarquer dans la partie basse des clichés expérimentaux que la zone où la vitesse du fluide est

orientée vers le culot de la goutte s'élargit quand on se rapproche de la paroi. On retrouve la même évolution dans les simulations.

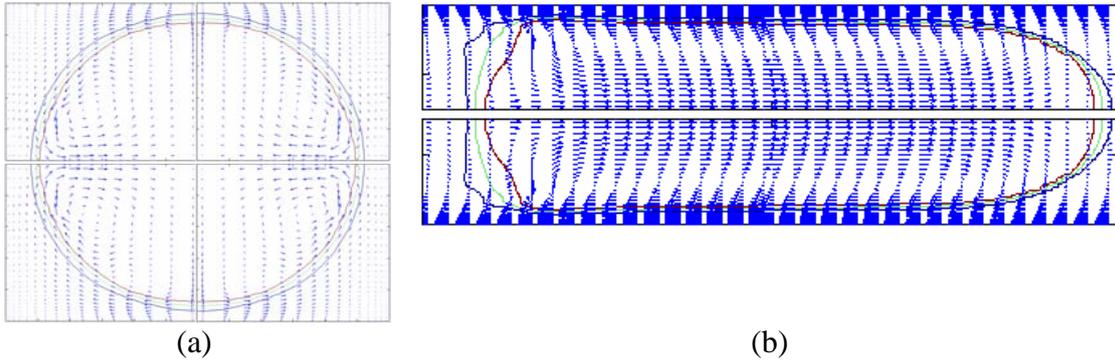


Figure 4.16: Champ de vitesse dans la goutte et dans le liquide (référentiel en translation avec la goutte). (a) coupe transversale au milieu de la goutte. (b) coupe horizontale dans le plan de symétrie (iso-contours $C=0,05-0,5-0,95$).

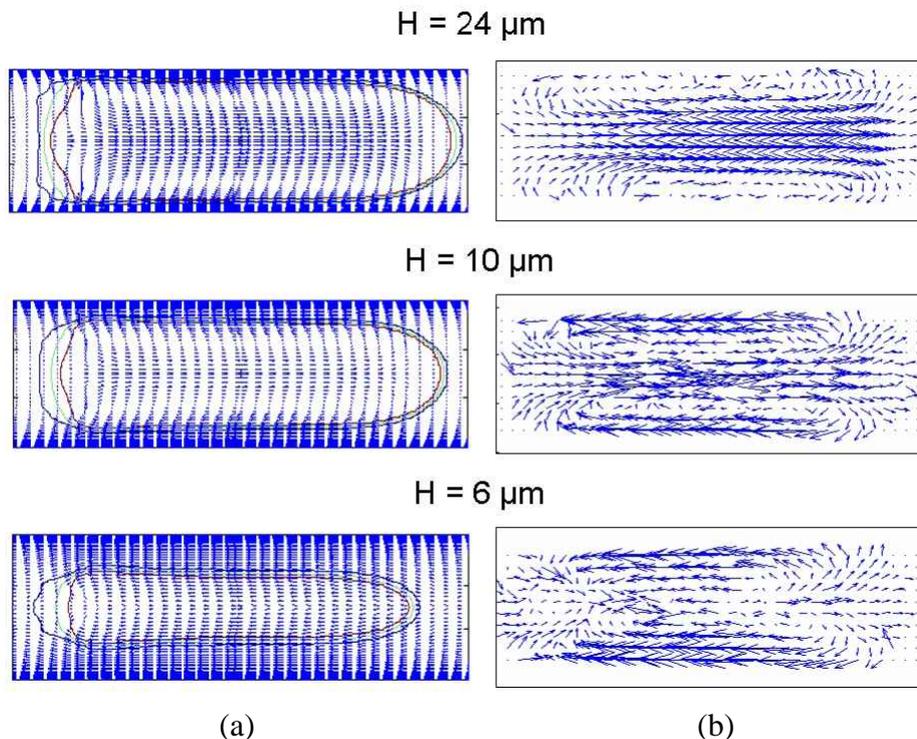


Figure 4.17: Comparaison des champs de vitesse dans le référentiel de la goutte. (a) Simulation tridimensionnelle ; (b) Mesures de micro-PIV. La hauteur $H=25\mu\text{m}$ correspond à la position du plan horizontal de symétrie, la hauteur $H=0\mu\text{m}$ à la position de la paroi.

Nous avons présenté ici un problème d'écoulement diphasique dont les échelles micrométriques rendaient les effets visqueux et surtout capillaires prédominants. Notre outil de simulation numérique est capable de reproduire précisément les caractéristiques globales (forme des gouttes, vitesse, débits) mais aussi locales (zones de recirculation, hydrodynamique dans le film liquide) de cet écoulement. Rappelons toutefois que la prédominance des effets capillaires introduit une

contrainte sur le pas de temps qui peut s'avérer limitante si l'on envisage par exemple une étude paramétrique exhaustive de configurations complètement tridimensionnelles. Enfin, nous avons mis en évidence l'existence de zones mortes dans le nez et le culot de la goutte en accord avec les observations expérimentales. La voie est donc ouverte à une étude plus approfondie de ces écoulements (influence de la forme des gouttes, de la géométrie, des interactions entre gouttes, du rapport des viscosités et des densités, du nombre capillaire, ...) pour d'une part mieux comprendre les phénomènes intervenant à ces échelles et d'autre part optimiser les différentes applications et procédés qui mettent en jeu des écoulements diphasiques en micro-canaux.

II. Forme d'une bulle isolée montant sous l'effet de la pesanteur

1) *Simulations axisymétriques dans la gamme (Bo=1-1000 ; Re=1-1000)*

Clift, Grace & Weber 1978 ont dressé une carte expérimentale des formes de bulles dans un diagramme dont les axes sont respectivement le nombre de Bond et le nombre de Reynolds, les iso-valeurs du nombre de Morton étant repérées. Ce diagramme est très utilisé notamment dans le domaine du génie des procédés. Nous avons réalisé une série de simulations axisymétriques dans une gamme de nombres de Morton $1.10^{-11} < Mo < 5.10^6$ et une gamme de nombres de Bond $1 < Bo < 1000$, correspondant a posteriori à une gamme de nombres de Reynolds $Re \approx 1 - 1000$ afin de comparer nos résultats avec ceux de *Clift et al. 1978*. Les nombres de Morton considérés correspondent à des fluides très variés, allant de l'eau ($Mo \sim 1.10^{-11}$) à des huiles extrêmement visqueuses (Mo très grands). Les tailles de bulles équivalentes varient de quelques fractions de millimètre à quelques centimètres. Suivant les cas considérés, la forme des bulles peut être contrôlée par les effets visqueux, inertiels, capillaires ou gravitaires. Ces simulations sont réalisées avec le même maillage qu'au Chapitre 3 – Partie III – Section 1 (140×700 cellules, 12,5d en hauteur, 5,5d en rayon, $d=60\Delta r$). Les paramètres fixes sont le rapport de densité $\rho_l/\rho_g = 100$ et le rapport de viscosité $\mu_l/\mu_g = 100$. Les conditions aux limites sont des symétries sur les frontières latérales et des parois sur les frontières inférieure et supérieure.

Notons que le caractère axisymétrique des simulations impose aux trajectoires des bulles d'être rectilignes. Or on sait qu'à partir d'un certain nombre de Reynolds (de l'ordre de quelques centaines) la trajectoire des bulles peut être tridimensionnelle. L'objectif ici est d'une part d'explorer le champ des paramètres pour lequel la description de l'interface se fait correctement et d'autre part de dresser la topologie des formes de bulles dans cette gamme de paramètres. Les différents cas simulés sont résumés dans le tableau 4.3.

Nombre de Morton	Bo = 1	Bo = 10	Bo = 100	Bo = 1000
Re \approx 1	(a) 5.10^{-3}	(b) 5	(c) 5.10^3	(d) 5.10^6
Re \approx 10	(e) 1.10^{-5}	(f) 1.10^{-2}	(g) 10	(h) 1.10^4
Re \approx 100	(i) 5.10^{-8}	(j) 5.10^{-6}	(k) 1.10^{-3}	(l) 1
Re \approx 1000	(m) 1.10^{-11}	(n) 1.10^{-9}	(o) 1.10^{-7}	(p) 1.10^{-4}

Tableau 4.3: Nombres de Bond et de Morton des simulations (les nombres de Reynolds sont des valeurs approximatives calculées a posteriori).

Les résultats sont présentés sur la figure 4.18 où différentes formes de bulles sont observées. Suivant la description de *Bhaga & Weber 1981* nous observons des bulles sphériques (cas a), des bulles ellipsoïdales (cas f, i et m), des bulles à jupe (cas g et h), des bulles toriques (cas k, l, o et p) et des bulles oscillantes (cas n). On peut noter un léger étalement de la zone de transition dans certains cas notamment dans les régions de pincement de l'interface (voir par exemple la jupe de la bulle correspondant au cas h). Ces résultats sont comparés aux expériences de *Bhaga & Weber 1981*, aux travaux numériques de *Ryskin & Leal 1984* et de *Unverdi & Tryggvason 1992* résumés dans la figure 4.19. Enfin, les formes terminales des bulles calculées sont reportées sur le diagramme de *Clift et al. 1978* (figures 4.20).

Les formes obtenues sont en bon accord avec les simulations de *Ryskin & Leal 1984* dans lesquelles les paramètres sont très proches des nôtres (cas c, f, i et j de la figure 4.18 et cas ε , ϕ , γ et η de la figure 4.19). Une bonne correspondance est également observée avec les résultats de *Bhaga & Weber 1981* même si leur nombres de Reynolds et de Bond sont un peu différents (cas c, g et h de la figure 4.18 et cas α , β et χ de la figure 4.19). Enfin la comparaison avec les simulations de *Unverdi & Tryggvason 1992* est satisfaisante pour les faibles nombres de Bond (cas e, f et i de la figure 4.18 et cas ι , φ et λ de la figure 4.19), et présente de légères différences pour les nombres de Bond de l'ordre de 100 et des nombres de Reynolds de l'ordre de 10, notamment à l'arrière de la bulle. Dans cette plage de paramètres nous observons une bulle présentant un début de jupe (cas g de la figure 4.18) tandis que *Unverdi & Tryggvason 1992* observent une bulle dont la jupe est beaucoup plus longue (cas κ de la figure 4.19). Il est possible qu'avec le maillage employé notre méthode ne soit pas suffisamment précise pour reproduire cette fine jupe ; cependant nos résultats sont très proches de la photographie de *Bhaga & Weber 1981* (cas β de la figure 4.19). En ce qui concerne les bulles toriques (cas k, l, o et p de la figure 4.18), elles ont déjà été observées dans les travaux numériques de *Sussman & Smereka 1997* et *Chen et al. 1999* où elles apparaissent à partir de nombres de Bond et de Reynolds de l'ordre de 100. Nous reviendrons sur la formation de ces tores dans la section suivante.

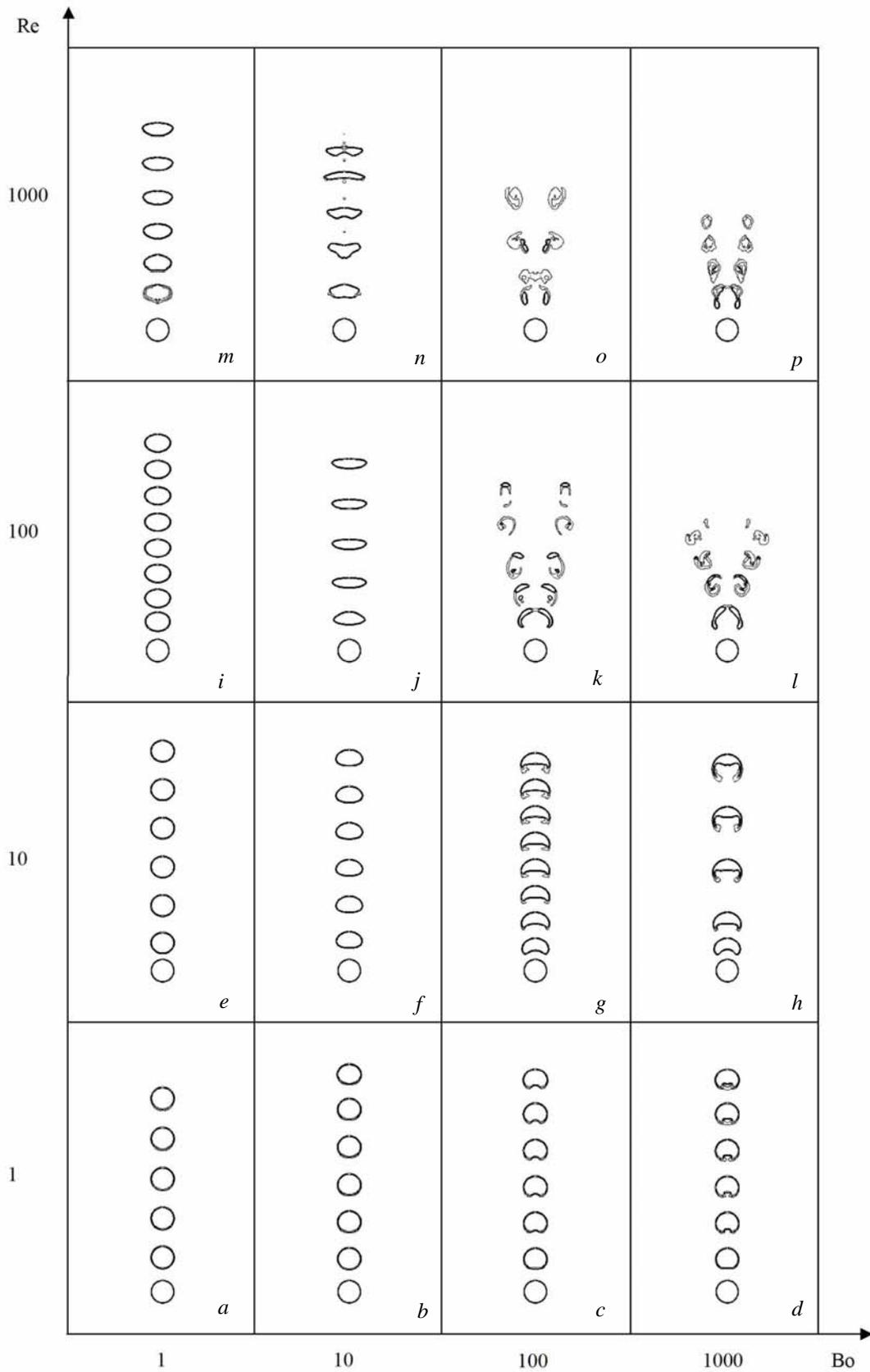


Figure 4.18: Evolution de la forme de bulles simulées (iso-contours $C=0,01-0,5-0,99$).
 $\rho_l / \rho_g = 100$, $\mu_l / \mu_g = 100$, $d = 60\Delta r$.

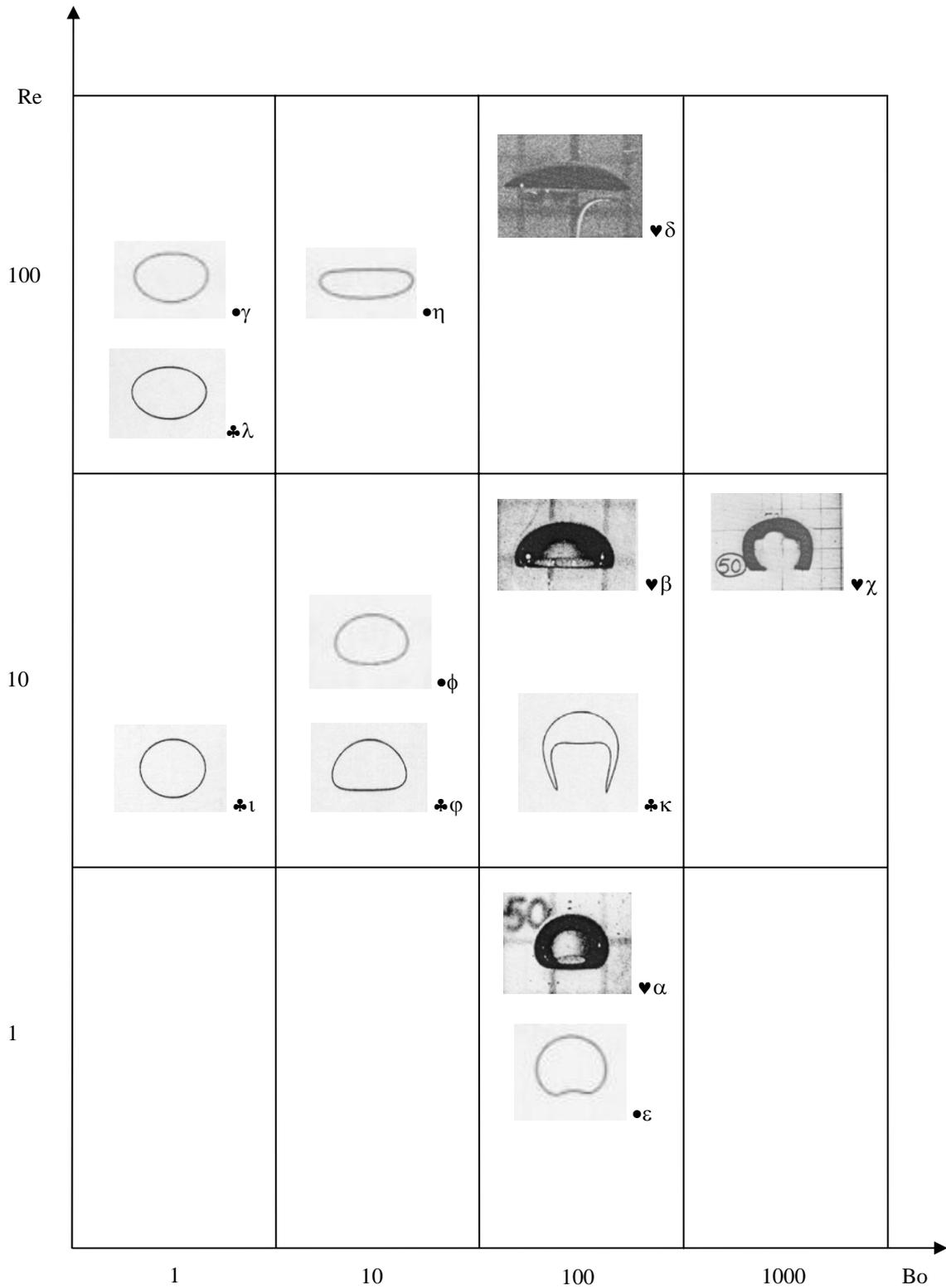


Figure 4.19: Quelques résultats de la littérature.

- ♣ Simulations de Unverdi & Tryggvason 1992.
- Simulations de Ryskin & Leal 1984.
- ♥ Expériences de Bhaga & Weber 1981.

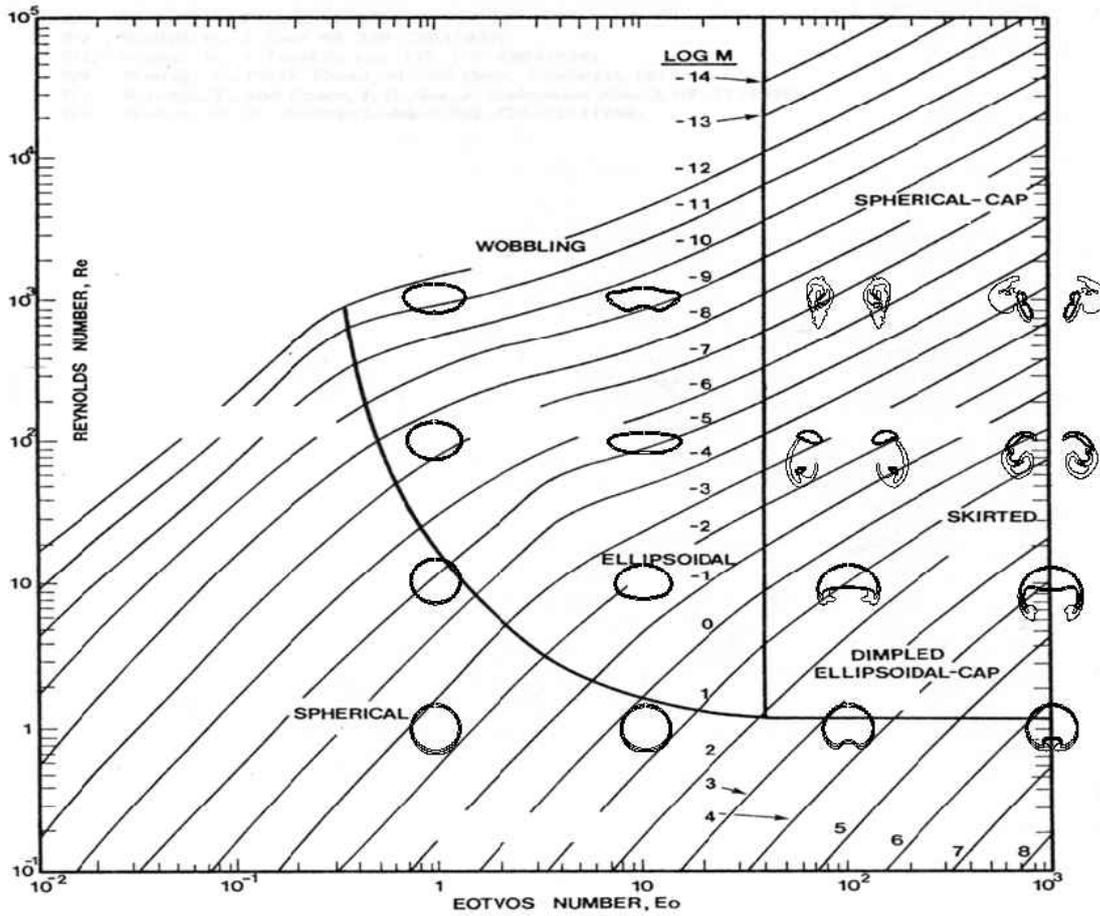


Figure 4.20: Diagramme de Clift Grace et Weber 1978 et formes de bulles simulées.

♣ Unverdi & Tryggvason 1992	ρ_1/ρ_g	μ_1/μ_g	Bo	Mo
(ι)	40	277	1	10^{-5}
(φ)	40	277	10	10^{-2}
(κ)	40	269	104	10
(λ)	40	88	1	10^{-7}

• Ryskin & Leal 1984	ρ_1/ρ_g	μ_1/μ_g	Re	We
(ε)	∞	∞	1	4
(φ)	∞	∞	10	4
(γ)	∞	∞	100	3
(η)	∞	∞	100	8

♥ Bhaga & Weber 1981	ρ_1/ρ_g	μ_1/μ_g	Bo	Mo	Re
(α)	1050	4000	116	848	2,47
(β)	1050	4000	116	5,51	13,3
(χ)	1050	4000	339	43,1	18,3
(δ)	1050	4000	115	$4,63 \cdot 10^{-3}$	94

Tableau 4.4: Paramètres des cas présentés sur la figure 4.19.

2) *Bulles toriques ou calottes sphériques ?*

Nous avons mentionné dans la section précédente que pour des nombres de Reynolds et de Bond supérieurs à 100 nous observons des bulles toriques. En effet sous l'effet de la gravité la bulle commence à monter et se déforme, l'arrière se déformant plus que l'avant car la gravité et la force capillaire se conjuguent, à tel point que l'arrière rejoint l'avant et perce l'interface au niveau de l'axe de symétrie, formant ainsi une bulle torique. Le rayon du tore augmente au fur et à mesure que la bulle monte tandis que le rayon de la section gazeuse diminue pour garder le volume de la bulle constant, jusqu'à atteindre la longueur capillaire. Dans certains cas le tore se déstabilise et se casse en bulles plus petites.

Certains travaux expérimentaux font état des bulles toriques pour des très grandes valeurs de nombre de Reynolds (*Walters & Davidson 1963*). On peut d'ailleurs produire de telles bulles en plongeant au fond d'une piscine puis en rejetant une bonne quantité d'air sans souffler. Cependant dans la gamme de paramètres ($Bo > 100$; $Re > 100$) on recense principalement des calottes sphériques (*Clift et al. 1978, Bhaga & Weber 1981*), tandis que les travaux numériques font état de bulles toriques (*Sussman & Smereka 1997, Chen et al. 1999*).

Considérons le couple de fluides dont les propriétés sont les suivantes (elles correspondent au cas k de la figure 4.18) :

Masse volumique du liquide ρ_l	1000 kg/m ³
Masse volumique dans la bulle ρ_g	10 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	0,05 kg/(m.s)
Viscosité dynamique dans la bulle μ_g	$0,05 \cdot 10^{-2}$ kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	0,03924 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre de la bulle d	0,02 m
Nombre de Morton M	10^{-3}
Nombre de Bond Bo	100
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	100
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	100

Les figures 4.21 et 4.22 décrivent l'ascension d'une bulle dont seule la forme initiale est différente. Dans un cas la bulle est initialement sphérique tandis que dans l'autre elle est ellipsoïdale de rapport de forme 2 (le volume est le même). Comme précédemment, le maillage comporte 140×700 cellules de calcul et la simulation est axisymétrique. Le nombre de Reynolds correspondant est de l'ordre de la centaine. Dans le premier cas (figure 4.21), la partie arrière de la bulle rejoint rapidement la partie avant pour former une fine couche de gaz qui se perce et entraîne la formation d'un premier tore. Dans un second temps une jupe se forme et se détache finalement du premier tore pour en former un second. La situation est tout à fait différente dans le second cas (figure 4.22). En effet la bulle prend une forme de calotte sphérique avec une très fine jupe. Une raison possible pour expliquer le fait que la bulle ne se casse pas est que l'écart de pression hydrostatique entre les pôles de la bulle est

moins grand quand celle-ci est aplatie et peut donc plus facilement être équilibré par la force capillaire. De plus il est clair que dans le cas de la forme ellipsoïdale la courbure locale aux pôles est plus faible que dans le cas de la forme sphérique.

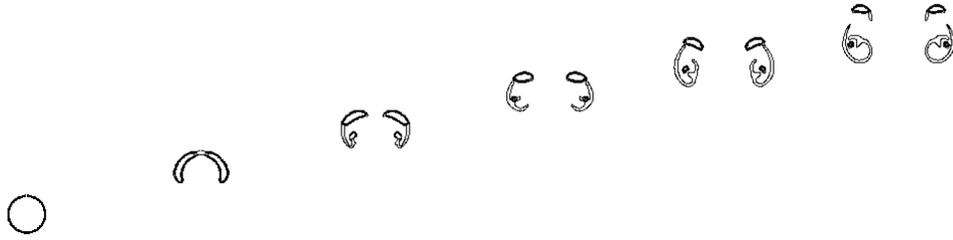


Figure 4.21: Formation d'une bulle torique. La forme initiale est une sphère. Le pas de temps entre chaque image est 0,1s. (iso-contours $C=0,05-0,5-0,95$).
 $Bo=100$, $Mo=1.10^{-3}$, $\rho_l/\rho_g=100$, $\mu_l/\mu_g=100$, maillage 140×700 , $d=60\Delta r$.

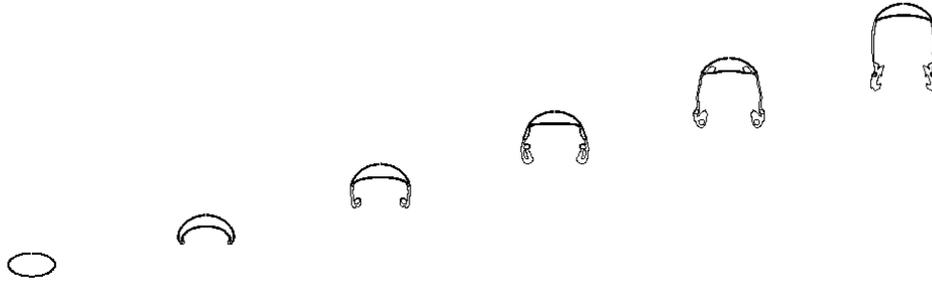


Figure 4.22: Formation d'une calotte sphérique. Identique à la figure 4.21 excepté la forme initiale qui est un ellipsoïde de révolution de rapport de forme 2.

Afin de vérifier si le phénomène n'est pas dû au caractère axisymétrique de la simulation, les mêmes cas avec la même condition initiale sont traités dans un domaine tridimensionnel (voir les figures 4.23 et 4.24). Le maillage comporte 60^3 cellules de calcul avec 20 cellules par diamètre initial de la bulle. Les conditions aux limites sont des symétries sur les frontières verticales et des conditions périodiques sur les frontières horizontales. Malgré la faible résolution, nous retrouvons bien les résultats obtenus dans les simulations axisymétriques, à savoir la formation de deux tores dans un cas et la formation d'une calotte sphérique dans l'autre. On remarque de plus sur la figure 4.23 des instabilités secondaires qui cassent les tores en bulles de plus petite taille ($\tau=6,42$ et $7,31$). Ces instabilités sont amplifiées par les interactions entre la bulle axisymétrique et les frontières latérales du domaine cubique. La formation de bulles toriques n'est donc pas due au caractère axisymétrique des simulations. Reste la question de la résolution spatiale.

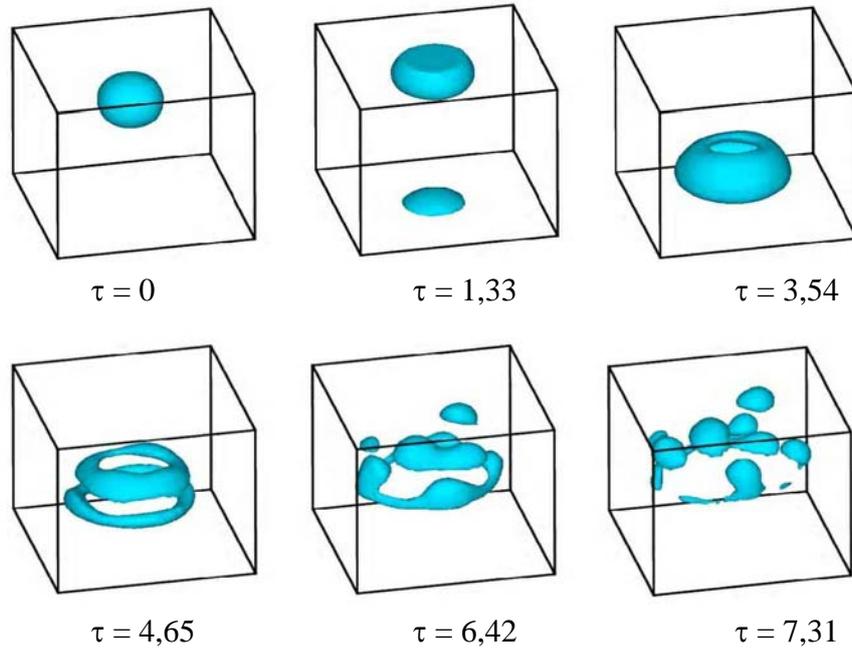


Figure 4.23: Formation d'une bulle torique. La forme initiale est une sphère. (Iso-surface $C=0,5$), $Bo=100$, $Mo=1.10^{-3}$, $\rho_l/\rho_g=100$, $\mu_l/\mu_g=100$, maillage 60^3 , $d=20\Delta x$. $\tau=t(g/d)^{1/2}$.

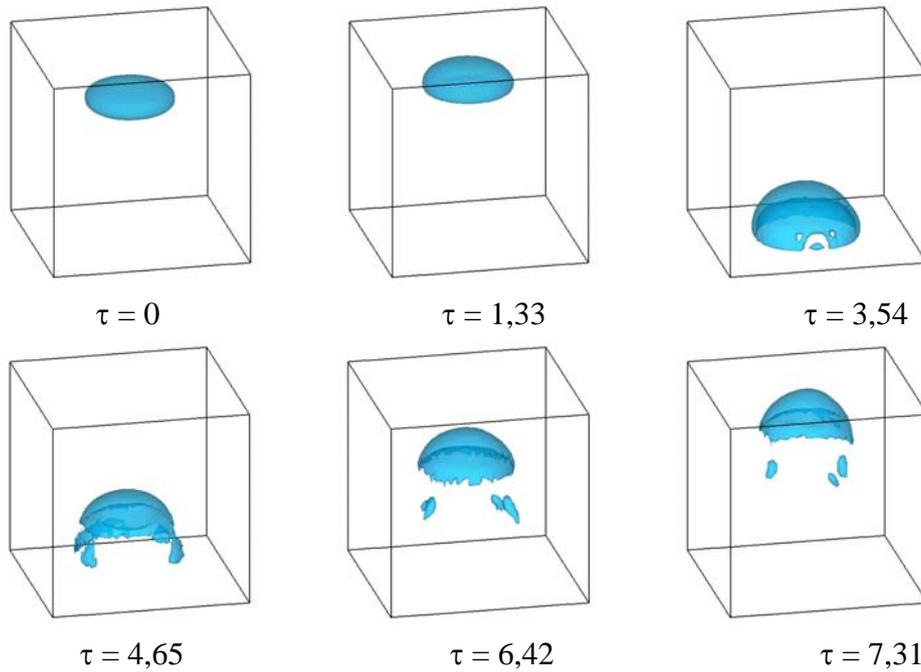


Figure 4.24: Formation d'une calotte sphérique. La forme initiale est un ellipsoïde de révolution de rapport de forme 2. (Iso-surface $C=0,5$), $Bo=100$, $Mo=1.10^{-3}$, $\rho_l/\rho_g=100$, $\mu_l/\mu_g=100$, maillage 60^3 , $d=20\Delta x$. $\tau=t(g/d)^{1/2}$.

Dans tous les phénomènes mettant en jeu la rupture ou la reconnection d'interfaces, la résolution spatiale joue un rôle important. Afin d'examiner l'influence sur la formation des bulles toriques, nous reprenons le cas de la figure 4.21 avec un maillage deux fois plus fin ($d/\Delta r=120$). Les résultats sont présentés sur la figure 4.25. Nous n'observons plus la formation d'une bulle torique ! A l'inverse la bulle prend une forme de calotte sphérique comme sur la figure 4.22 mais avec une jupe plus courte. Nous pouvons donc conclure que les bulles toriques prédites par les figures 4.21 et 4.23 sont des solutions issues de simulations insuffisamment résolues, même si il y avait 60 cellules de calcul par diamètre initial de bulle dans le cas de la figure 4.21.

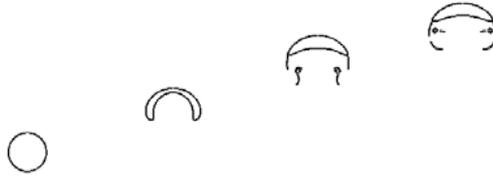


Figure 4.25: Cas identique à la figure 4.21 avec $d=120\Delta r$.

La raison pour laquelle cette situation nécessite une telle résolution spatiale peut s'expliquer qualitativement en considérant l'amortissement des ondes de gravité-capillarité. La longueur caractéristique de ces oscillations est $l_{gc} = (\sigma/\rho_1 g)^{1/2}$ et leur vitesse de phase est $c_{gc} \approx (g\sigma/\rho_1)^{1/4}$. L'amortissement de ces oscillations intervient majoritairement quand la longueur de dissipation visqueuse l_v est telle que le nombre de Reynolds $\rho_1 c_{gc} l_v / \mu_1$ bâti avec la vitesse de phase de l'onde est inférieur ou égal à un, ce qui implique que la longueur de dissipation visqueuse en dessous de laquelle cet amortissement domine est $l_v^{\max} = \mu_1 / (\rho_1^3 g \sigma)^{1/4}$. Avec les paramètres utilisées ici ($\rho_1=10^3$ kg/m³ ; $\mu_1=5 \cdot 10^{-2}$ kg/m/s ; $\sigma=3,924 \cdot 10^{-2}$ N/m ; $g=9,81$ m/s²), il vient $l_v^{\max} / d \approx 1,8 \cdot 10^{-2}$ ce qui est très faible. De plus, avec $\Delta r/d=1/60$, nous obtenons $l_v^{\max} / \Delta r \approx 1,07$: la taille de la cellule de calcul est du même ordre de grandeur que celle de l_v^{\max} la résolution n'est donc pas suffisante pour capturer correctement l'amortissement. En divisant Δr par deux, le phénomène est mieux résolu et on observe des calottes sphériques.

Les résultats qui précèdent mettent en évidence l'extrême sensibilité de l'évolution des bulles à grand nombre de Bond et de Reynolds à la résolution spatiale ainsi qu'à la condition initiale. Concernant ce deuxième aspect, il est possible qu'il se retrouve expérimentalement. En effet pour contrôler le volume des bulles de taille importante, une certaine quantité d'air est souvent injectée dans le liquide et emprisonnée sous une sorte de cuillère jusqu'à obtenir le volume adéquat. La cuillère est ensuite retournée rapidement. Les bulles sont donc initialement aplaties. On peut se demander ce qui se passerait si les bulles avaient initialement une forme plus sphérique. Enfin notons que la forme des bulles toriques étant fortement instationnaire, il est difficile d'en tirer des données précises (forme, vitesse), tandis que les calottes sphériques ont une forme et une vitesse très rapidement stationnaires et sont donc plus faciles à étudier. Ces différents aspects montrent à quel point la compréhension de l'évolution des bulles dans le régime des grands nombres de Reynolds et de Bond reste délicate.

3) *Bulle traversant une interface liquide-liquide*

On considère maintenant la traversée d'une interface liquide-liquide par une bulle de gaz qui monte sous l'effet de la gravité. L'objectif est de mettre en évidence l'influence des propriétés physiques du fluide inférieur sur l'interaction entre la bulle et l'interface, et ainsi d'évaluer l'entraînement de fluide dans le sillage de la bulle. Ce problème est capital dans l'étape de mise à nuance de l'acier liquide, pour laquelle des bulles d'argon sont injectées dans un bain d'acier liquide lui-même recouvert d'une émulsion de laitier. Sous l'effet d'entraînement par les bulles, de l'acier liquide peut traverser la couche de laitier et ainsi être projeté sur les parois supérieures de la cuve, détériorant cette dernière. La configuration traitée est illustrée sur la figure 4.26. Considérons une bulle de gaz A dans un fluide B recouvert d'un fluide plus léger C. Les densités des fluides sont notées ρ_A , ρ_B , ρ_C , les viscosités μ_A , μ_B , μ_C et les tensions de surface σ_{AB} , σ_{BC} , σ_{AC} . Trois configurations sont traitées (tableaux 4.4, 4.5 et 4.6), pour lesquelles nous avons fait varier soit la densité ρ_B soit la viscosité μ_B du fluide B. Les simulations sont axisymétriques, le maillage comporte 140×560 cellules de calcul dans les directions (r,z). Il est cartésien et régulier ($\Delta r = \Delta z = 6 \cdot 10^{-4}$ m). Les conditions aux limites sont des symétries sur les frontières verticales et des parois sur les frontières horizontales. La bulle est initialement ellipsoïdale de rapport de forme 2 ; elle a pour volume 40 cm^3 .

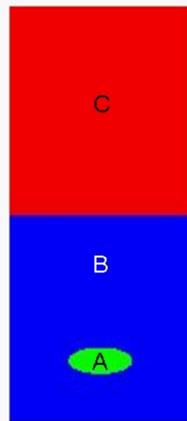


Figure 4.26: Configuration initiale.

Dans le cas n°1 (figure 4.27), la bulle se déforme pour prendre rapidement une forme ellipsoïdale plissée en accord avec les résultats de *Clift et al. 1978* ($0 < \tau \leq 6,08$). Au moment où elle arrive sur l'interface, le nez de la bulle est très arrondi et sa forme change progressivement pour tendre vers celle d'une calotte sphérique. Entre les temps $\tau = 7,60$ et $9,12$ le point de la ligne triple a migré de l'avant de la bulle vers l'arrière. Au regard de la position du nez, la vitesse d'ascension est constante au passage de l'interface (l'écart de temps entre les clichés est le même). Enfin la bulle entraîne du fluide B dans son sillage sans pour autant que la colonne de liquide ne se casse (en tout cas jusqu'à $\tau = 10,64$).

Dans le cas n°2 (figure 4.28), la bulle prend dans le fluide B une forme de calotte sphérique et son nez est beaucoup plus plat que dans le cas précédent (comparer les formes à $\tau=4,56$). La surface de contact entre la bulle et le fluide C est 1,5 à 2 fois plus grande que dans le cas n°1. Au passage de l'interface la bulle ralentit énormément car la force d'Archimède est beaucoup plus faible dans le fluide C que dans le fluide B. Sa forme se modifie, et contrairement au cas n°1, le fluide B est drainé le long de la surface de la bulle jusqu'à ce que les points de la ligne triple se rejoignent à l'arrière de la bulle et forment un simple cordon de fluide ($\tau=9,12$). La forme finale de la bulle est du type bulle à jupe. Son volume est nettement moins important qu'avant la traversée de l'interface, car du gaz est resté emprisonné à l'interface liquide-liquide.

Il est évident au regard des cas n°1 et 2 que les phénomènes qui ont lieu au niveau de l'interface sont singulièrement différents quand le fluide inférieur a la même densité que le fluide supérieur ou quand il est beaucoup plus lourd. Les principales différences sont la forme et la vitesse de la bulle au moment de la traversée de l'interface et la présence ou non d'entraînement massif de liquide dans le sillage.

On peut se demander si la forme de la bulle avant la traversée de l'interface conditionne la vitesse de traversée et l'entraînement de liquide inférieur. Pour donner un élément de réponse, considérons le cas n°3 (figure 4.29) pour lequel la viscosité du fluide B est dix fois plus faible que dans le cas n°1. Ici, la bulle a bien une forme de calotte sphérique avant de traverser l'interface ($\tau=4,56$), mais sa vitesse ne semble pas diminuer. De plus la bulle entraîne une grande quantité de fluide B dans son sillage car la ligne triple n'est pas passée derrière la bulle.

Afin de vérifier si des effets tridimensionnels n'interviennent pas dans les phénomènes précédents, nous avons également réalisé des simulations tridimensionnelles de ces configurations. Une simulation équivalente au cas n°1 est présentée sur la figure 4.30. Le maillage comporte $60 \times 60 \times 120$ cellules de calcul. Il est cartésien et régulier ($\Delta x = \Delta y = \Delta z = 2 \cdot 10^{-3} \text{m}$) et a pour dimensions $0,12\text{m} \times 0,12\text{m} \times 0,24\text{m}$. Les conditions aux limites sont des symétries sur les frontières verticales et des parois sur les frontières horizontales. Aucun effet tridimensionnel notable n'est observé et les conclusions sont les mêmes que dans le cas axisymétrique. On peut supposer que la perte de symétrie apparaîtra dès que la trajectoire de la bulle avant la traversée de l'interface sera non rectiligne et que l'angle d'attaque de la bulle sera non nul.

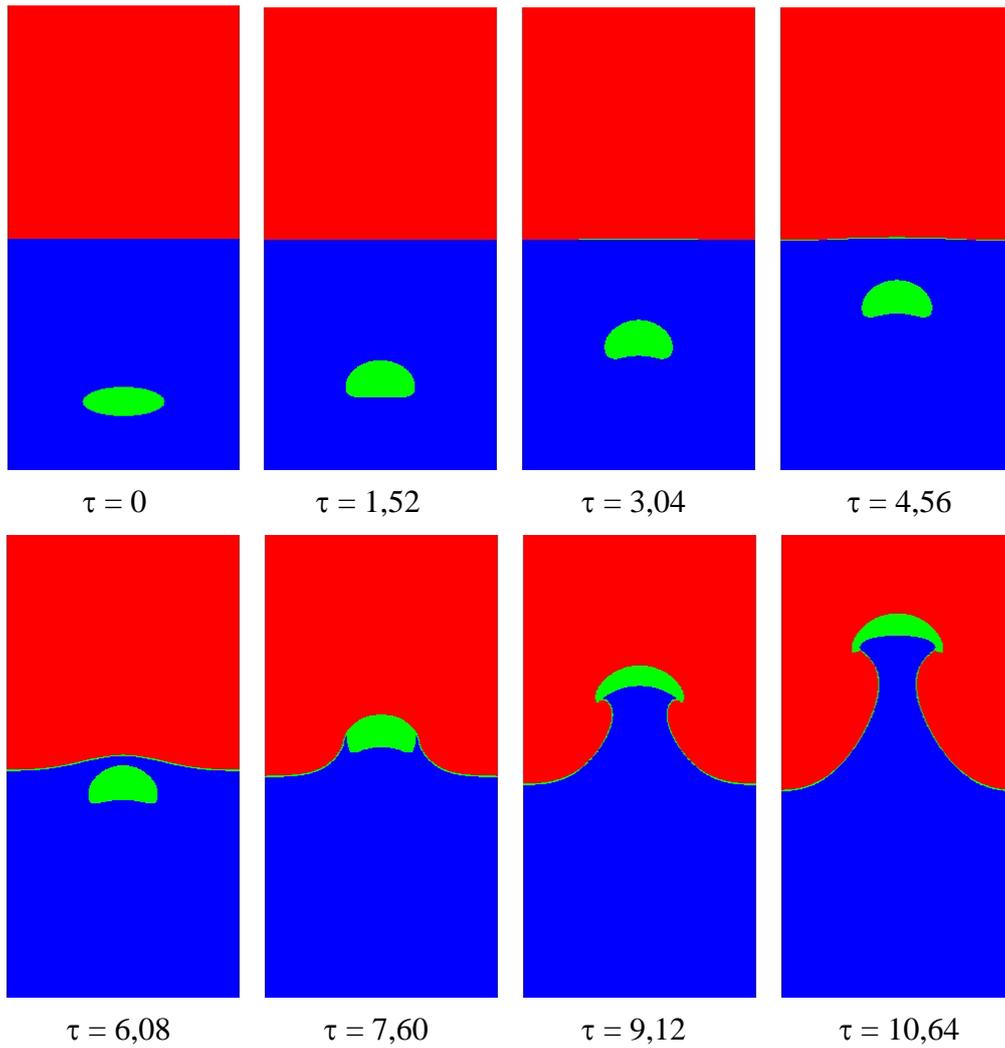


Figure 4.27: Cas n°1. Traversée d'une interface liquide-liquide par une bulle. $\tau=t(g/d)^{1/2}$. Iso-contours $C_A+3C_C = 0,5 - 2,5$.

CAS n°1	AZOTE – EAU (15 Poises) – EAU (0,6 Poises)
Masses volumiques $\rho_A - \rho_B - \rho_C$	1,95 - 1000 – 1000 kg/m ³
Viscosités dynamiques $\mu_A - \mu_B - \mu_C$	$1,32 \cdot 10^{-5}$ – 1,554 – $5,7 \cdot 10^{-2}$ kg/(m.s)
Tensions de surface $\sigma_{AB} - \sigma_{BC} - \sigma_{AC}$	0,487 – 0,375 – 0,07 N/m
Diamètre équivalent de la bulle d	0,0424 m
Gravité g	9,81 m/s ²
Rapports de densité $\rho_B/\rho_A - \rho_C/\rho_A - \rho_B/\rho_C$	513 – 513 – 1
Rapports de viscosité $\mu_B/\mu_A - \mu_C/\mu_A - \mu_B/\mu_C$	118000 – 4320 – 27
Nombres de Morton $Mo_{AB} - Mo_{AC}$	0,5 – $3 \cdot 10^{-4}$
Nombres de Bond $Bo_{AB} - Bo_{AC}$	36 - 252

Tableau 4.5: Cas n°1.

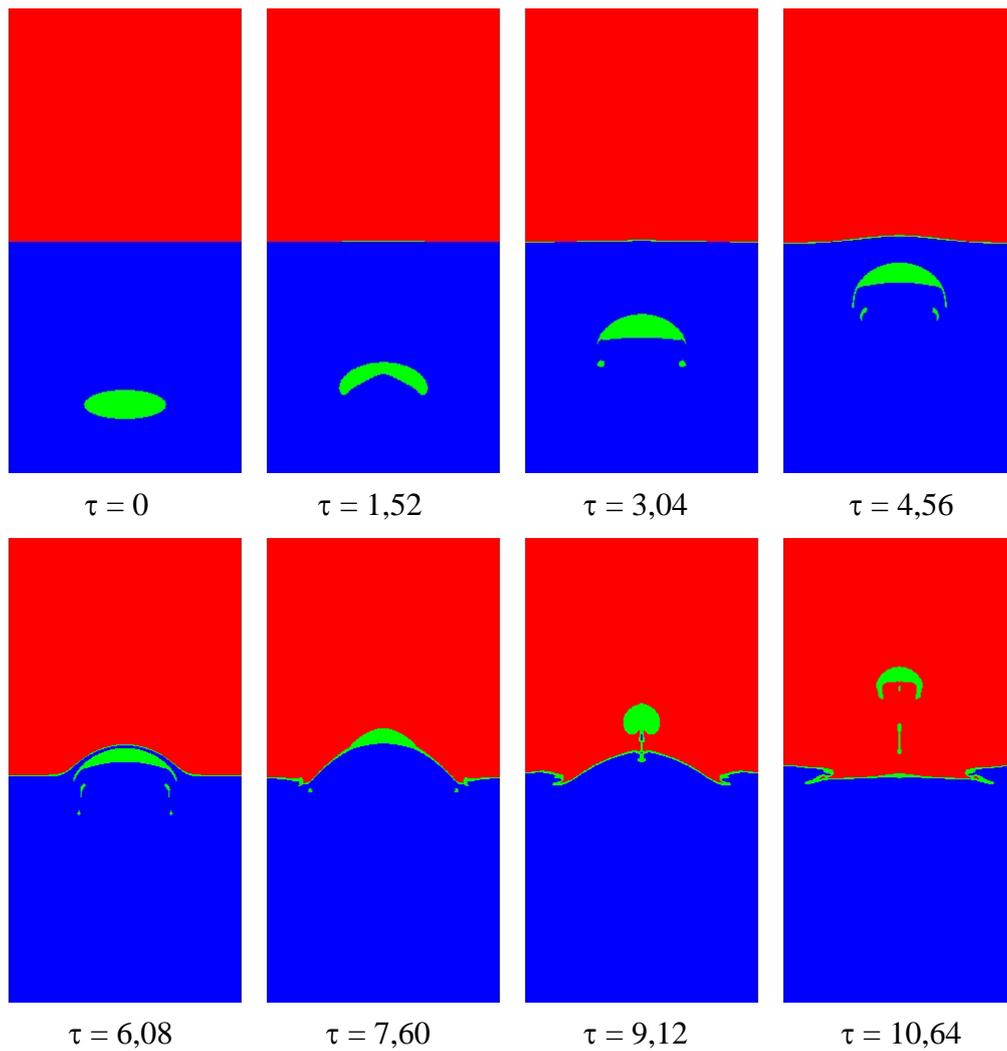


Figure 4.28: Cas n°2. Traversée d'une interface liquide-liquide par une bulle. $\tau=t(g/d)^{1/2}$. Iso-contours $C_A+3C_C = 0,5 - 2,5$.

CAS n°2	AZOTE – MERCURE (15 Poises) – EAU (0,6 Poises)
Masses volumiques $\rho_A - \rho_B - \rho_C$	1,95 - 13600 - 1000 kg/m ³
Viscosités dynamiques $\mu_A - \mu_B - \mu_C$	$1,32 \cdot 10^{-5}$ - 1,554 - $5,7 \cdot 10^{-2}$ kg/(m.s)
Tensions de surface $\sigma_{AB} - \sigma_{BC} - \sigma_{AC}$	0,487 - 0,375 - 0,07 N/m
Diamètre équivalent de la bulle d	0,0424 m
Gravité g	9,81 m/s ²
Rapports de densité $\rho_B/\rho_A - \rho_C/\rho_A - \rho_B/\rho_C$	6974 - 513 - 13,6
Rapports de viscosité $\mu_B/\mu_A - \mu_C/\mu_A - \mu_B/\mu_C$	118000 - 4320 - 27
Nombres de Morton $Mo_{AB} - Mo_{AC}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$ - $3 \cdot 10^{-4}$
Nombres de Bond $Bo_{AB} - Bo_{AC}$	490 - 252

Tableau 4.6: Cas n°2.

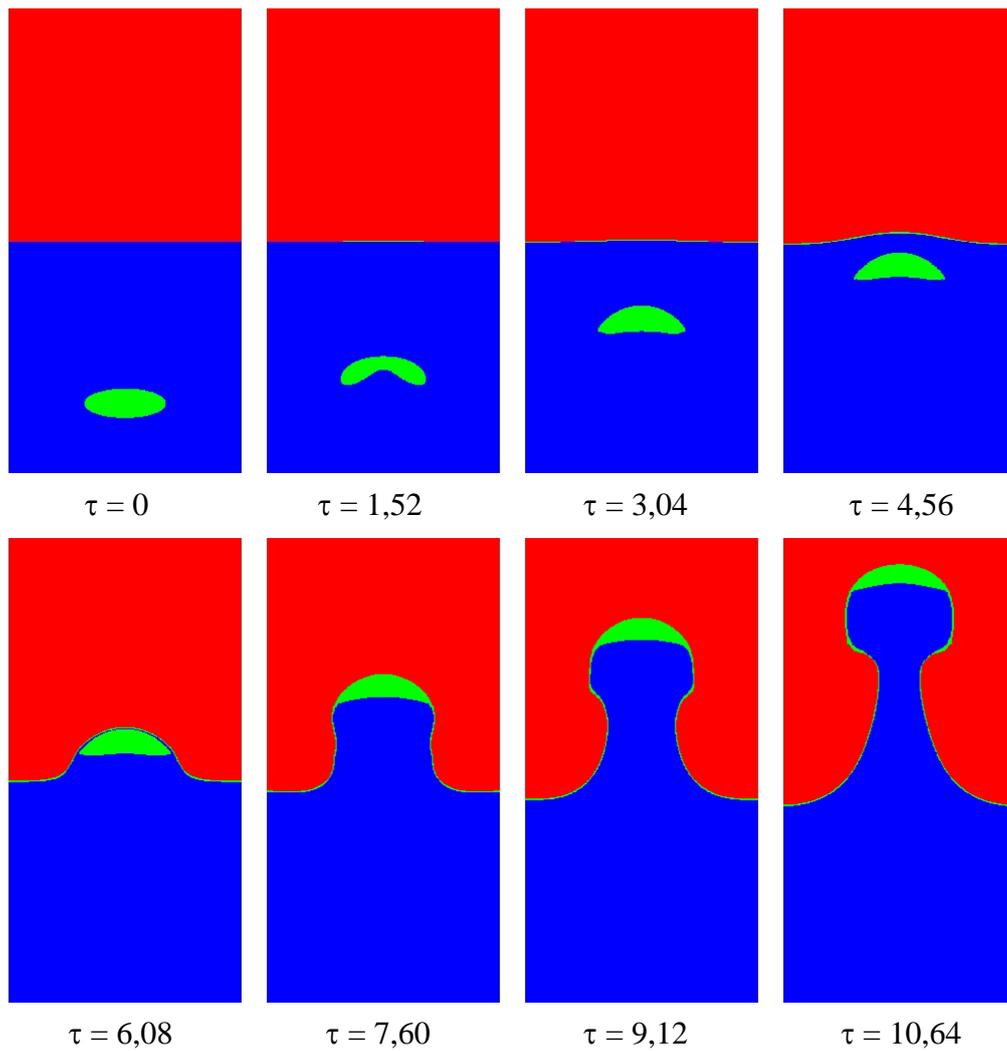


Figure 4.29: Cas n°3. Traversée d'une interface liquide-liquide par une bulle. $\tau=t(g/d)^{1/2}$. Iso-contours $C_A+3C_C = 0,5 - 2,5$.

CAS n°3	AZOTE – EAU (1,5 Poises) – EAU (0,6 Poises)
Masses volumiques $\rho_A - \rho_B - \rho_C$	1,95 - 1000 – 1000 kg/m ³
Viscosités dynamiques $\mu_A - \mu_B - \mu_C$	$1,32 \cdot 10^{-5}$ – $1,554 \cdot 10^{-1}$ – $5,7 \cdot 10^{-2}$ kg/(m.s)
Tensions de surface $\sigma_{AB} - \sigma_{BC} - \sigma_{AC}$	0,487 – 0,375 – 0,07 N/m
Diamètre équivalent de la bulle d	0,0424 m
Gravité g	9,81 m/s ²
Rapports de densité $\rho_B/\rho_A - \rho_C/\rho_A - \rho_B/\rho_C$	513 – 513 – 1
Rapports de viscosité $\mu_B/\mu_A - \mu_C/\mu_A - \mu_B/\mu_C$	11800 – 4320 – 2,7
Nombres de Morton $Mo_{AB} - Mo_{AC}$	$5 \cdot 10^{-5}$ – $3 \cdot 10^{-4}$
Nombres de Bond $Bo_{AB} - Bo_{AC}$	36 - 252

Tableau 4.7: Cas n°3.

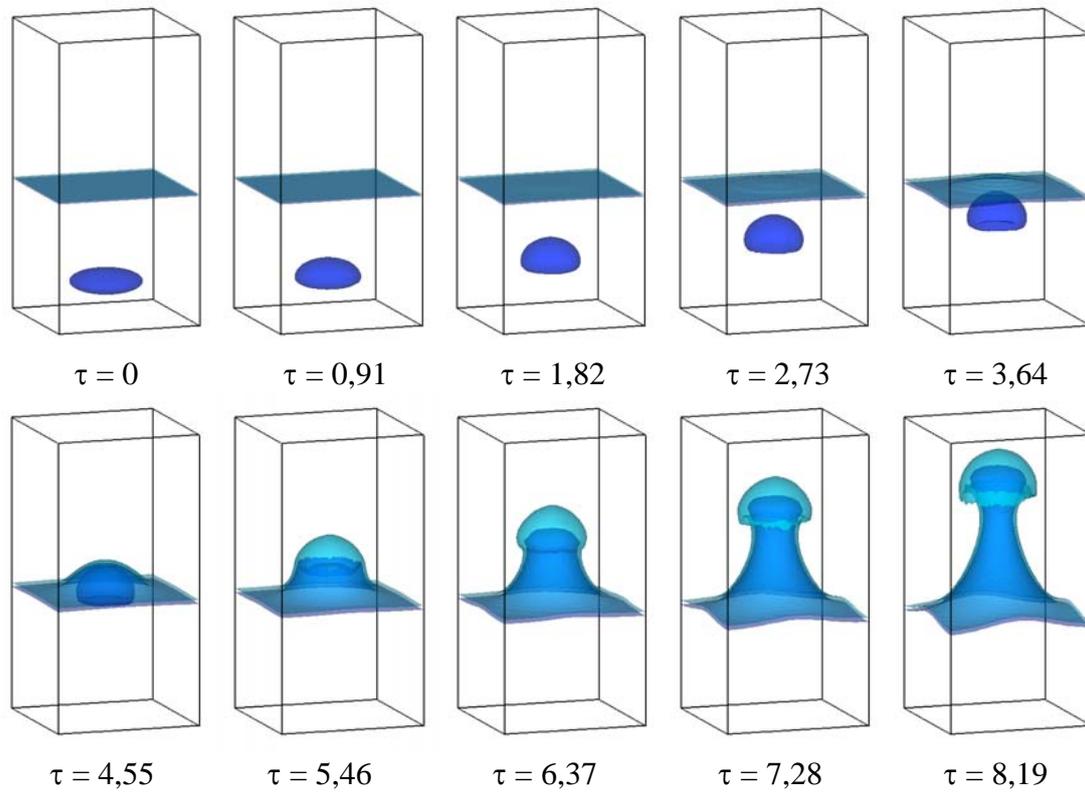


Figure 4.30: Cas n°1. Simulation tridimensionnelle. $\tau=t(g/d)^{1/2}$.
Iso-surfaces $C_A+3C_C = 0,5 - 2,5$.

III. Dynamique d'un nuage de bulles

La simulation numérique directe de l'ascension d'une suspension de bulles constitue actuellement un objectif majeur pour la compréhension de la microstructure des écoulements à bulles. Elle oppose cependant de très sérieuses difficultés, car ces suspensions peuvent exhiber des structures à grande échelle (parfois jusqu'à celle de la veine expérimentale) qui sont issues d'interactions qui ont lieu à petite échelle (de l'ordre de quelques fractions de rayon de bulles). Le problème se complique encore si l'on veut décrire de façon tridimensionnelle les inhomogénéités macroscopiques d'une suspension comportant un grand nombre de bulles, et si les bulles se déforment, se cassent ou coalescent. C'est pourquoi peu d'études numériques ont été réalisées sur le sujet. Les travaux de référence dans ce domaine sont bien sûr ceux de l'équipe de Tryggvason qui a développé un code de suivi d'interface de type Front Tracking (*Unverdi & Tryggvason 1992*) capable de décrire la dynamique d'une suspension d'environ 200 bulles dans la gamme de nombre de Bond $Bo=1-5$ et de nombre de Reynolds $Re=20-30$ (*Bunner & Tryggvason 2002, 2003*).

1) *Suspension à nombre de Reynolds modéré*

L'objectif de cette section est de simuler l'ascension d'un nuage de bulles dans une gamme de nombre de Reynolds $Re=20-30$. Deux cas sont présentés, l'un avec 8 bulles, l'autre avec 27 bulles. Les paramètres sont choisis de façon à pouvoir comparer les résultats avec ceux des simulations de *Esmaeeli & Tryggvason 1999* et *Bunner & Tryggvason 2002* respectivement.

Nuage de 8 bulles

Nous considérons deux fluides dont les propriétés sont recensées dans le tableau suivant :

Masse volumique du liquide ρ_l	1000 kg/m ³
Masse volumique dans la bulle ρ_g	50 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	$1,0473 \cdot 10^{-1}$ kg/(m.s)
Viscosité dynamique dans la bulle μ_g	$5,2365 \cdot 10^{-3}$ kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	0,4905 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre de la bulle d	0,01 m
Nombre de Morton M	$1 \cdot 10^{-5}$
Nombre de Bond Bo	2
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	20
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	20
Nombres de bulles	8
Taux de vide	$\pi/48 \approx 6,54\%$

Le domaine de calcul est tridimensionnel et comporte 100^3 cellules de calcul. Les dimensions sont $(4d)^3$ dans les directions (x,y,z) . Les frontières sont périodiques dans toutes les directions. Le pas de temps est $\Delta t=1,2 \cdot 10^{-4}$ s. Huit bulles décrites par 25 cellules par diamètres sont initialement réparties dans le domaine suivant un réseau cubique simple. Le taux de vide vaut 6,54% (voir figure 4.31 à $\tau=0$). Le liquide est initialement au repos. A $t>0$ on applique un champ de gravité $\mathbf{g}=-g\mathbf{e}_z$.

La figure 4.31 montre l'évolution de la suspension de bulles. Pour plus de clarté seule l'iso-surface $C=0,5$ est représentée. Sous l'effet de la gravité le nuage se met en mouvement. Les bulles gardent une distribution homogène jusqu'à $\tau=15,03$ et elles ont une forme sphérique légèrement aplatie. A $\tau=18,79$ les bulles qui étaient jusque-là contenues dans deux plans horizontaux sortent de ces plans et se mettent à coalescer avec la bulle qui se trouve juste au dessus d'elles. A $\tau=22,55$ on compte six bulles et il n'en reste plus que quatre à $\tau=37,59$. A la fin de la simulation les bulles ont parcouru une distance d'environ 30 diamètres et leur trajectoire est restée essentiellement rectiligne. La figure 4.32 compare l'évolution de la vitesse moyenne de la suspension (a) calculée dans notre simulation (relation 3.13) et (b) obtenue par *Esmaeli & Tryggvason 1999*. Dans notre cas, la vitesse augmente rapidement pour atteindre une valeur correspondant à un nombre de Reynolds équivalent de 25, puis chute jusqu'à $Re=17$ pour augmenter à nouveau jusqu'à $Re=25$. On retrouve ce type de comportement dans la figure (b) où le nombre de Reynolds fluctue dans la gamme $Re=20-25$. On calcule la vitesse moyenne \bar{U}_L du liquide via la relation (4.3) ci-dessous (C désigne le taux de présence du gaz, \mathbf{U} la vitesse locale et \mathcal{V} le volume du domaine de calcul). On détermine ensuite les corrélations $u'_{iL}u'_{jL}$ de fluctuations de vitesse dans le liquide via la relation (4.4). On calcule de même la vitesse moyenne \bar{U}_G dans le gaz et les corrélations $u'_{iG}u'_{jG}$ en remplaçant dans (4.3) et (4.4) l'indice L par G, et $(1-C)$ par C .

$$\bar{U}_{iL} = \int_{\mathcal{V}} (1-C) U_i d\mathcal{V} / \int_{\mathcal{V}} (1-C) d\mathcal{V} \quad (4.3)$$

$$u'_{iL}u'_{jL} = \int_{\mathcal{V}} (1-C) (U_i - \bar{U}_{iL}) (U_j - \bar{U}_{jL}) d\mathcal{V} / \int_{\mathcal{V}} (1-C) d\mathcal{V} \quad (4.4)$$

La figure 4.33 compare l'évolution des fluctuations de vitesse dans le liquide obtenue dans notre simulation et avec celles de *Esmaeli & Tryggvason 1999*. Nous y avons séparé l'énergie des mouvements verticaux (k_{LV}) de celle des mouvements horizontaux (k_{LH}). L'évolution des fluctuations fournies par les deux méthodes est très similaire tant du point de vue de la dynamique que de l'amplitude. Dans les deux cas, l'intensité de l'agitation horizontale est environ dix fois plus faible que celle des mouvements verticaux. Notons la présence de pics à $\tau \approx 22$ dans la figure (a) correspondant à l'apparition de la coalescence (figure 4.31 à $\tau=18,79$ et $22,55$).

La différence majeure entre nos résultats et ceux de *Esmaeli & Tryggvason 1999* concerne la présence de la coalescence dans nos simulations. Il faut souligner que la technique de suivi d'interface utilisée par *Esmaeli & Tryggvason 1999* (méthode du type Front Tracking) empêche, sauf procédure particulière, les interfaces de se rompre ou de se reconnecter tandis que notre méthode de capture de front l'autorise. Inversement, nous avons déjà mentionné au Chapitre 3 – Partie III – Section 3 que la résolution spatiale et le lissage du taux de présence utilisé dans le calcul

du terme capillaire jouent un rôle important dans l'apparition de la coalescence. Il est clair que dans cette simulation où d'une part la résolution est inférieure à celle des simulations bidimensionnelles et d'autre part les effets capillaires sont importants ($Bo=2$), la coalescence est favorisée.

Pour vérifier si la coalescence observée numériquement est en accord avec la physique, nous comparons les temps t_I d'interaction entre les bulles juste avant la coalescence et t_D , le temps de drainage du film liquide. Si t_I est supérieur à t_D , le film liquide est drainé entièrement et la coalescence a lieu. Ces deux temps sont calculés via les relations (4.5) et (4.6) pour t_I et t_D respectivement (*Kamp et al. 2001*).

$$t_I = \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{\rho_l C_M d^3}{3\sigma}} \quad \text{avec} \quad C_M=0,803 \quad (4.5)$$

$$t_D = \frac{\rho_l V_a d^2}{8\sigma} \quad (4.6)$$

où C_M est le coefficient de masse ajoutée donné par la théorie potentielle dans le cas de deux sphères de même rayon en contact et alignées dans le sens de l'écoulement ; V_a est la vitesse de rapprochement des bulles. Nous calculons une estimation de la vitesse d'approche des bulles qui coalescent en premier, en comparant la distance inter-bulles à différents instants. Nous en déduisons une vitesse d'approche d'environ 0,175m/s, un temps d'interaction $t_I=1,9 \cdot 10^{-2}$ s et un temps de drainage $t_D=4,5 \cdot 10^{-3}$ s : cette dernière valeur est inférieure à $1,9 \cdot 10^{-2}$ nous sommes donc bien dans le régime où les bulles coalescent.

La figure 4.34 présente l'évolution des composantes des tenseurs $u'_{iL} u'_{jL}$ et $u'_{iG} u'_{jG}$. Elles sont adimensionnées par le carré de la vitesse gravitationnelle $(gd)^{1/2}$ (*Esmaeli & Tryggvason 1999*). Nous avons distingué les composantes diagonales $u'u'$, $v'v'$ et $w'w'$ des composantes non-diagonales $u'v'$, $u'w'$ et $v'w'$ car l'intensité de ces dernières est beaucoup plus faible. L'intensité des fluctuations « verticales » $w'w'$ est cinq à dix fois plus grande que celle des fluctuations « horizontales » $u'u'$ et $v'v'$ que ce soit dans le liquide ou dans le gaz. De plus, ces dernières se superposent exactement (nous verrons par la suite que ce n'est pas toujours le cas), ce qui atteste de l'isotropie des mouvements horizontaux. On retrouve sur les graphes (a) et (c) la présence d'un pic à $\tau \approx 22$ coïncidant avec l'apparition de la coalescence dans la suspension. Un deuxième pic est observé à $\tau \approx 37$; il est beaucoup plus prononcé dans le gaz que dans le liquide. Il correspond à une deuxième coalescence (voir figure 4.31 $\tau=26,31-37,59$). L'existence de ces pics est logique car on sait que le phénomène de coalescence est très localisé dans le temps et très intense en termes de déformation des bulles. Il engendre donc de grandes variations de la vitesse du gaz. L'intensité des fluctuations croisées $u'v'$, $u'w'$ et $v'w'$ est cinquante à cent fois plus faible que celles des fluctuations principales $u'u'$, $v'v'$ et $w'w'$. Notons aussi que les fluctuations dans le gaz sont environ deux fois plus importantes que dans le liquide.

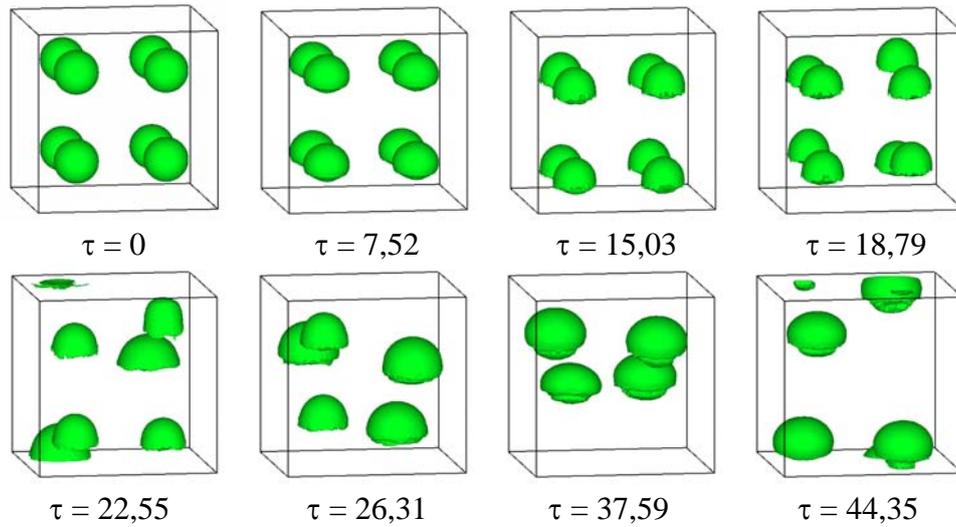


Figure 4.31: Ascension d'un nuage de 8 bulles. $\tau=t(g/d)^{1/2}$. Iso-surface $C=0,5$; $Re \approx 20-30$, $Bo=2$, $Mo=1.10^{-5}$, $\rho_l/\rho_g=20$, $\mu_l/\mu_g=20$. maillage 100^3 , $d=25\Delta x$.

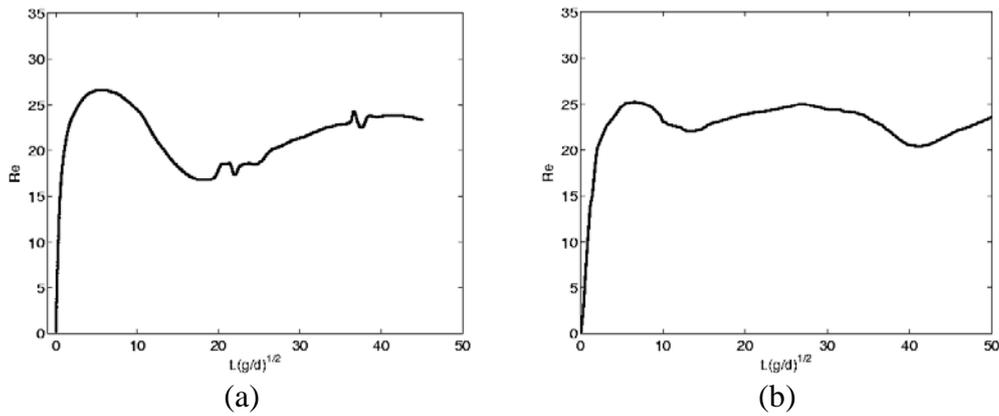


Figure 4.32: Evolution de la vitesse d'ascension de la suspension de bulles. (a) Résultats de nos simulations. (b) Résultats de Esmaeeli & Tryggvason 1999.

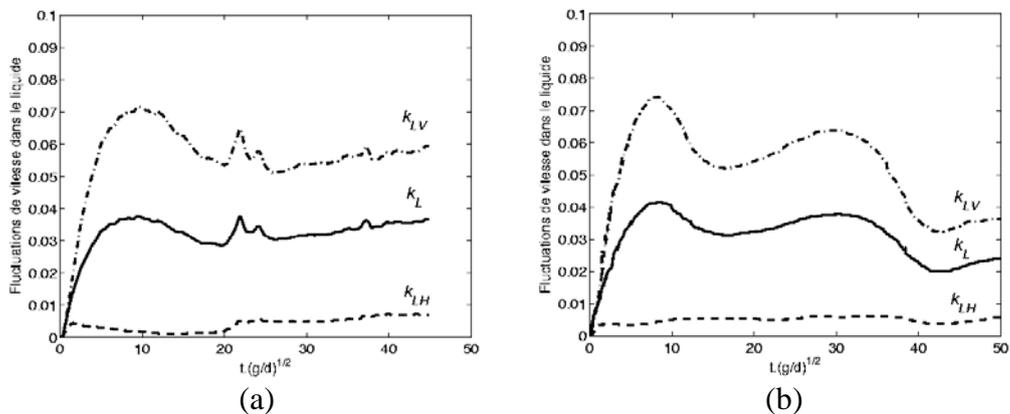


Figure 4.33: Fluctuations de vitesse dans le liquide. $k_{LV}=w'_{LW}'_L/gd$; $k_{LH}=(u'_{LU}'_L+v'_{LV}'_L)/2gd$; $k_L=(u'_{LU}'_L+v'_{LV}'_L+w'_{LW}'_L)/2gd$. (a) Résultats de nos simulations. (b) Résultats de Esmaeeli & Tryggvason 1999.

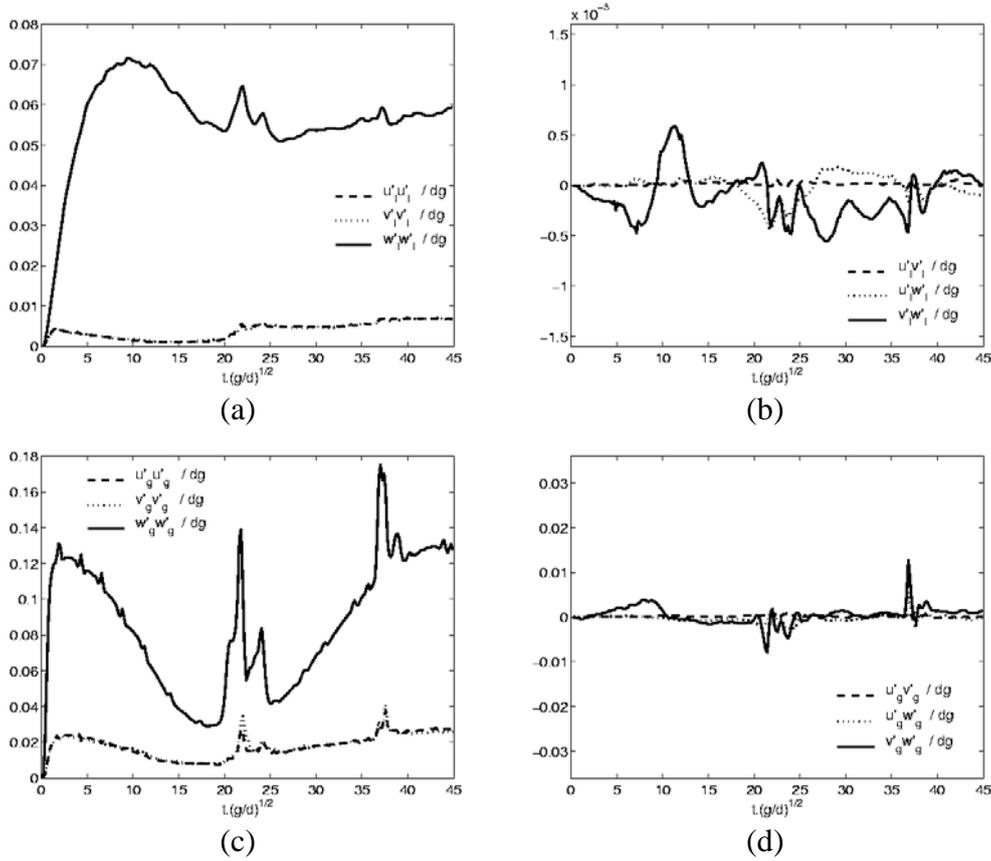


Figure 4.34: Composantes du tenseur de Reynolds.
(a-b) dans le liquide. (c-d) dans le gaz.

Nuage de 27 bulles

Nous conservons le même maillage que précédemment mais les dimensions deviennent $(6,18d)^3$. Le pas de temps du calcul est $\Delta t = 3,5 \cdot 10^{-4}$ s. 27 bulles sont initialement réparties dans le domaine, toujours suivant un réseau cubique simple. Le taux de vide vaut 6% (voir figure 4.35 $\tau=0$). Il y a cette fois 16 cellules de calcul par diamètre initial de bulle. Les propriétés des fluides sont :

Masse volumique du liquide ρ_l	1000 kg/m ³
Masse volumique dans la bulle ρ_g	20 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	$1,04403 \cdot 10^{-1}$ kg/(m.s)
Viscosité dynamique dans la bulle μ_g	$2,08806 \cdot 10^{-3}$ kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	0,1962 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre de la bulle d	0,01 m
Nombre de Morton M	$1,543 \cdot 10^{-4}$
Nombre de Bond Bo	5
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	50
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	50
Nombres de bulles	27
Taux de vide	6%

La figure 4.35 montre l'évolution du nuage de bulles. Ici les bulles parcourent au total une distance équivalente à 80 fois leur diamètre environ. Comme dans la simulation précédente les bulles coalescent très rapidement dès que leur trajectoire n'est plus rectiligne et qu'elles s'approchent les unes des autres. Notons qu'elles se déforment plus que dans le cas du nuage de 8 bulles ($\tau=16,44-32,89$), ce qui est attendu au vu du nombre de Bond plus important ($Bo=5$). Le nombre de bulles décroît au cours du temps. On compte 27 bulles à $\tau=41,11$, et seulement 6 bulles à $\tau=73,92$. A cause de la coalescence le diamètre des bulles augmente. Elles se déforment alors beaucoup plus et leur trajectoire devient fortement non rectiligne. Les calculs des temps t_I d'interaction des bulles avant coalescence et t_D de drainage du film liquide (relations 4.5 et 4.6) donnent $t_I=2,9 \cdot 10^{-2}$ s et $t_D=8,2 \cdot 10^{-3}$ s (la vitesse d'approche vaut 0,128 m/s). Le temps de drainage est inférieur au temps d'interaction. Nous sommes donc bien dans le régime où les bulles coalescent.

La figure 4.36 montre l'évolution de la vitesse moyenne de la suspension (a) dans notre simulation (b) obtenue par *Bunner & Tryggvason 2002*. Nous observons sur la figure (a) qu'après un régime transitoire la vitesse se stabilise à une valeur correspondant à $Re=25$. A partir d'un temps $\tau \approx 40$, la vitesse fluctue fortement autour d'une valeur correspondant à $Re=30$. Le temps $\tau \approx 40$ correspond au moment où les bulles commencent à coalescer. Il est donc normal qu'à partir de cet instant la vitesse moyenne du nuage augmente car le nombre de bulles est plus faible et leur volume respectif est plus grand. L'évolution de la vitesse dans la figure (b) reste au contraire stable autour d'une valeur $Re \approx 23$. La comparaison des fluctuations de vitesse dans le liquide (figure 4.37) et dans le gaz (figure 4.38) entre les résultats que nous obtenons et ceux de *Bunner & Tryggvason 2002* montre une évolution similaire jusqu'à $\tau \approx 40$. Entre $\tau \approx 40$ et $\tau \approx 100$, la coalescence apparaît dans nos simulations et les fluctuations de vitesse augmentent d'un facteur six et trois dans le liquide et dans le gaz, respectivement.

Afin de pouvoir comparer les résultats à ceux correspondant à l'ascension de la suspension de huit bulles, nous portons sur la figure 4.39 un agrandissement de l'évolution des composantes des tenseurs $u'_{iL}u'_{jL}$ et $u'_{iG}u'_{jG}$ jusqu'à $\tau=45$. Nous retrouvons la forte intensité des fluctuations verticales $w'w'$ par rapport à celle des fluctuations horizontales $u'u'$ et $v'v'$ dans les deux phases. Les fluctuations $u'u'$ et $v'v'$ se superposent exactement ici aussi. Aucun pic n'est observé car la coalescence n'est pas encore apparue ($\tau < 40$). Enfin les fluctuations dans le gaz sont à nouveau deux fois plus importantes que dans le liquide.

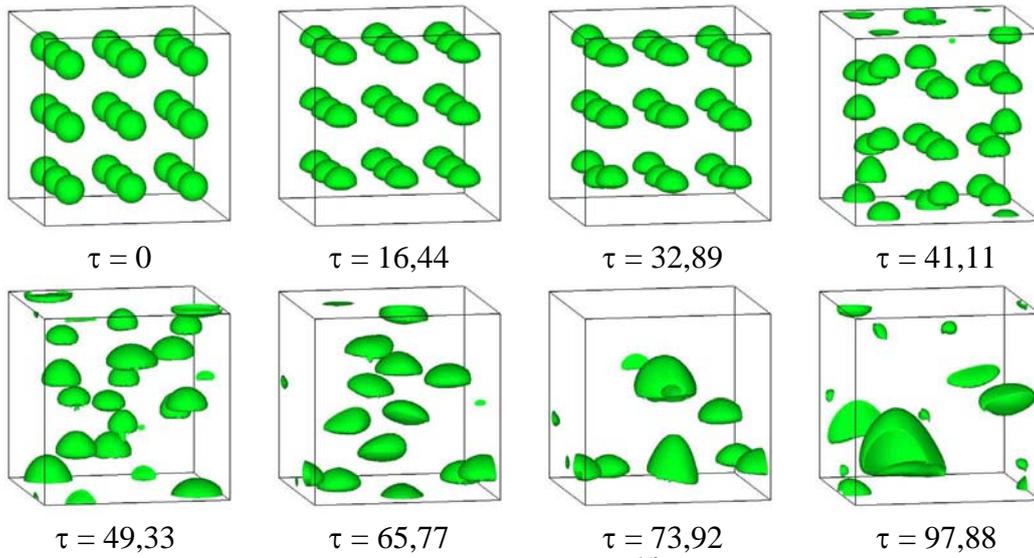


Figure 4.35: Ascension d'un nuage de 27 bulles. $\tau=t(g/d)^{1/2}$. Iso-surface $C=0,5$; $Re \approx 20-30$, $Bo=5$, $Mo=1,543 \cdot 10^{-4}$, $\rho_l/\rho_g=50$, $\mu_l/\mu_g=50$. maillage 100^3 , $d=16\Delta x$.

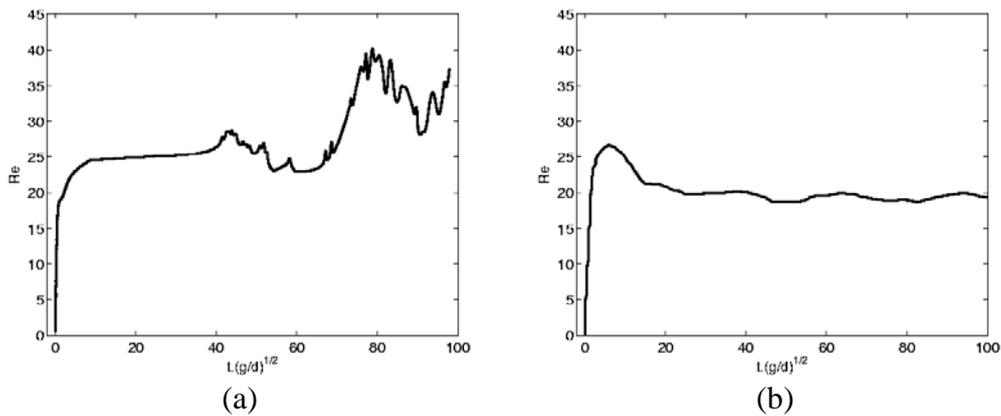


Figure 4.36: Evolution de la vitesse d'ascension de la suspension de bulles. (a) Résultats de nos simulations. (b) Résultats de Bunner & Tryggvason 2002.

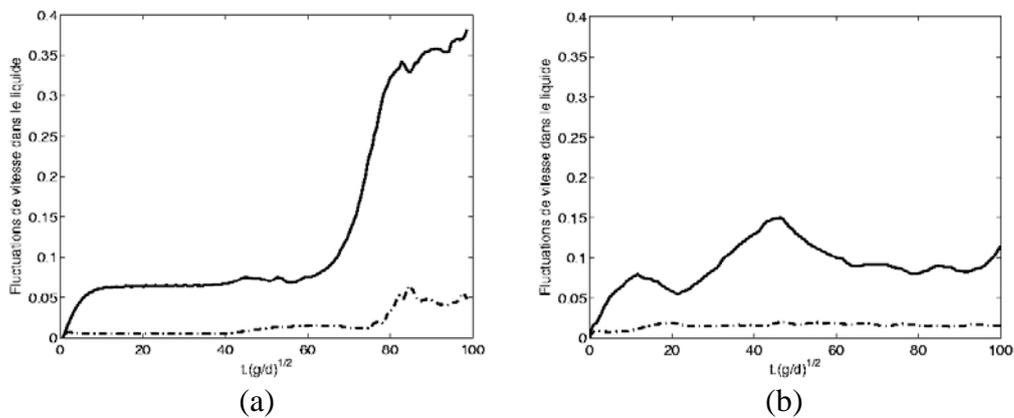


Figure 4.37: Fluctuations de vitesse dans le liquide. (—) : $k_{LV}=w'_L w'_L/gd$. (---) : $k_{LH}=(u'_L u'_L + v'_L v'_L)/gd$. (a) Résultats de nos simulations. (b) Résultats de Bunner & Tryggvason 2002.

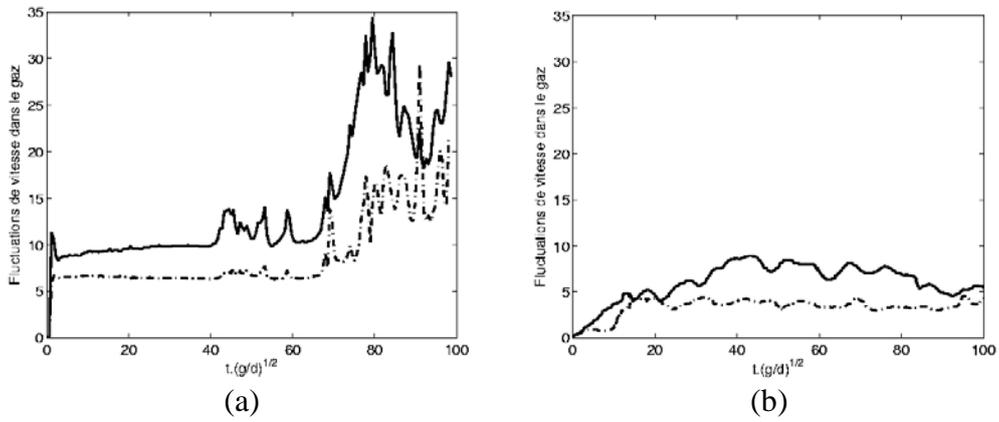


Figure 4.38: Fluctuations de vitesse dans le gaz.
 (—) : $\rho_l(w'_G w'_G)^{1/2} d / \mu_l$; (---) : $\rho_l(u'_G u'_G + v'_G v'_G)^{1/2} d / \mu_l$.

(a) Résultats de nos simulations. (b) Résultats de Bunner & Tryggvason 2002.

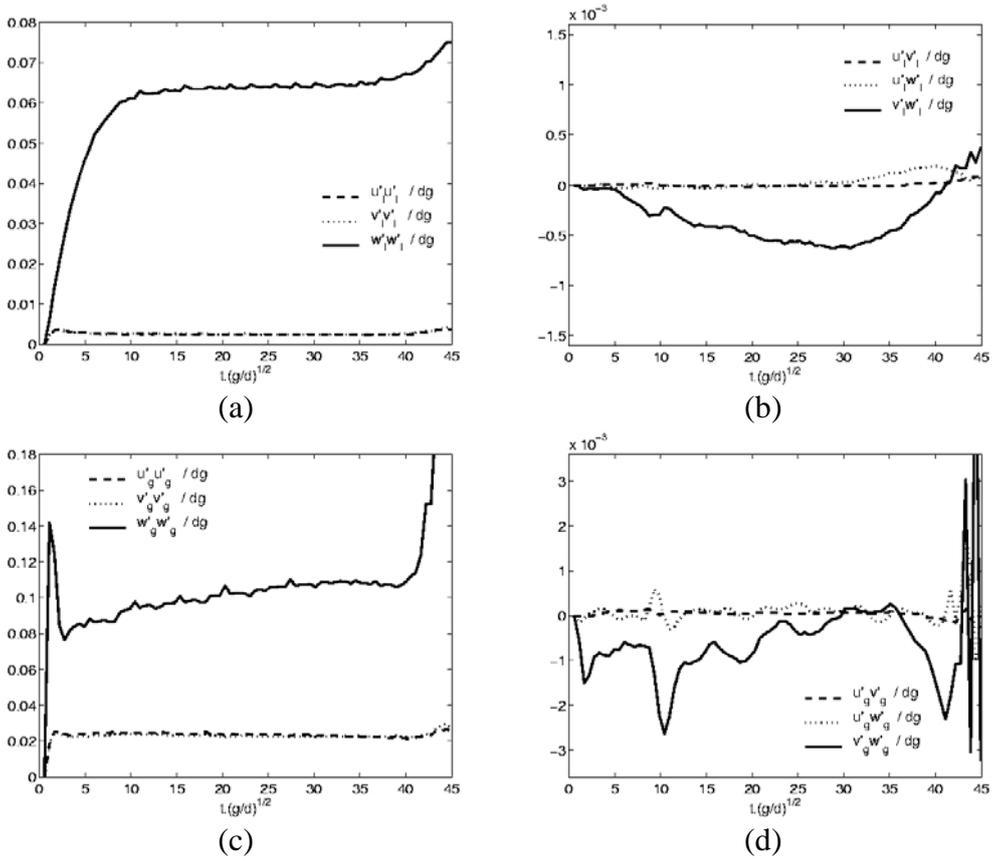


Figure 4.39: Composantes du tenseur de Reynolds.
 (a-b) dans le liquide. (c-d) dans le gaz

2) *Suspension à grand nombre de Reynolds*

Cette dernière section concerne l'ascension d'un nuage de bulles à des nombres de Reynolds beaucoup plus importants, de l'ordre de 200. Notons que cette gamme de nombre de Reynolds n'a jamais été abordée par l'équipe de Tryggvason. L'objectif est de voir si l'on observe le même type de comportement que dans la gamme de nombre de Reynolds $Re=20-30$. La configuration est la même que dans la simulation précédente. Les seules différences sont les dimensions du domaine qui sont $(6d)^3$, le taux de vide qui vaut 6,57% et les propriétés des fluides qui sont recensées dans le tableau suivant :

Masse volumique du liquide ρ_l	1000 kg/m ³
Masse volumique dans la bulle ρ_g	10 kg/m ³
Viscosité dynamique du liquide μ_l	$1,76 \cdot 10^{-2}$ kg/(m.s)
Viscosité dynamique dans la bulle μ_g	$1,76 \cdot 10^{-4}$ kg/(m.s)
Tension de surface entre les deux fluides σ	0,981 N/m
Gravité g	9,81 m/s ²
Diamètre de la bulle d	0,01 m
Nombre de Morton M	10^{-9}
Nombre de Bond Bo	1
Rapport de densité ρ_l/ρ_g	100
Rapport de viscosité μ_l/μ_g	100
Nombres de bulles	27
Taux de vide	6,57%

La figure 4.40 montre l'évolution de la suspension de bulles. Durant la simulation, les bulles ont parcouru environ 40 diamètres. Leurs trajectoires, initialement rectilignes ($\tau=0$ à $\tau=2,57$) se déstabilisent au bout d'une distance d'ascension d'environ dix diamètres. Les bulles se mettent alors à zigzaguer ($\tau=5,11$ à $\tau=9,99$). Elles se rapprochent les unes des autres puis coalescent ($\tau=14,13$ à $\tau=28,31$). Leur nombre passe de 27 à 5 entre $\tau=0$ et $\tau=28,31$. Le volume moyen de chaque bulle a été multiplié approximativement par trois. Pour vérifier si la coalescence observée numériquement est en accord avec la physique, nous calculons les temps t_I d'interaction des bulles avant coalescence et t_D de drainage du film liquide (relations 4.5 et 4.6). Nous obtenons $t_I=1,3 \cdot 10^{-2}$ s et $t_D=3,5 \cdot 10^{-4}$ s (la vitesse d'approche vaut 0,275 m/s). Le temps de drainage est très inférieur au temps d'interaction. Nous sommes donc bien dans le régime où les bulles coalescent. A $\tau=28,31$ la distribution des tailles de bulles est très dispersée ; on peut voir sur la figure correspondante une bulle dont le diamètre est de l'ordre de d à côté d'une bulle dont le diamètre est deux fois plus grand. Le nombre de Reynolds à $\tau=6,3$ (juste avant la coalescence) est d'environ 280. Il est basé sur la vitesse barycentrique moyenne du nuage de bulles et le diamètre initial d'une bulle. La figure 4.41 montre l'évolution de la vitesse moyenne de la suspension. De $\tau=0$ à $\tau=10$, elle augmente jusqu'à ce se stabiliser à une valeur correspondant à un nombre de Reynolds $Re \approx 250$ puis augmente à nouveau dès que la coalescence commence ($\tau > 10$) pour atteindre à la fin de la simulation une

valeur correspondant à $Re \approx 400$. Le nombre de Weber $We = \rho_l V^2 d / \sigma$ vaut environ 2 juste avant la coalescence.

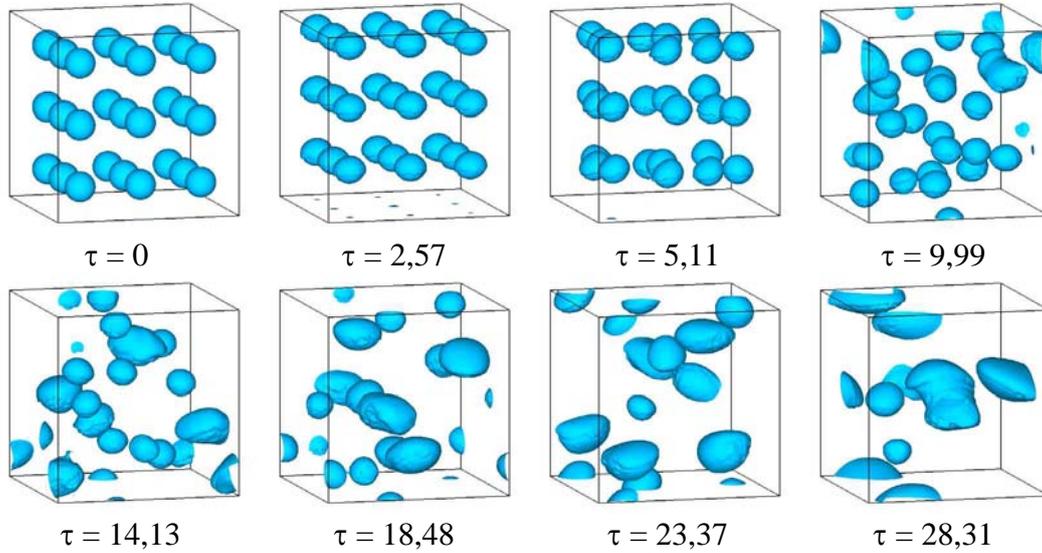


Figure 4.40: Ascension d'un nuage de bulles. $\tau = t(g/d)^{1/2}$. Iso-surface $C=0,5$; $Re \approx 280$, $Bo=1$, $Mo=1.10^{-9}$, $\rho_l/\rho_g=100$, $\mu_l/\mu_g=100$. maillage 100^3 , $d=16\Delta x$.

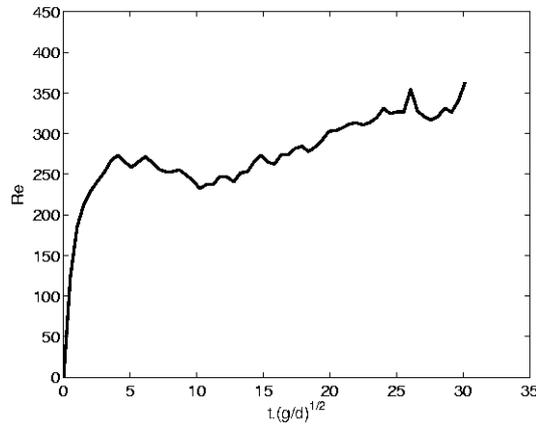


Figure 4.41: Vitesse d'ascension du nuage de bulles. La coalescence commence vers $\tau = t(g/d)^{1/2} = 10$.

Les fluctuations de vitesse dans le liquide (figure 4.42a-b) de cette suspension présentent certaines différences avec celles observées dans la gamme de nombres de Reynolds $Re=20-30$. Tout d'abord l'intensité des fluctuations de vitesse est nettement plus importante ici. Elle est environ 2,5 fois supérieure à celle observée dans la gamme $Re=20-30$. L'intensité des corrélations croisées rapportée à celle des corrélations principales est d'environ 5% au lieu de 1% pour $Re=20-30$. L'importance relative des fluctuations $u'_{LU}u'_L$ et $v'_{LV}v'_L$ par rapport à $w'_{LW}w'_L$ est également plus grande ici. Les fluctuations de vitesse dans le gaz (figure 4.42c-d) présentent des évolutions différentes de celles observées dans la gamme $Re=20-30$. D'une part les corrélations $u'_{GU}u'_G$ et $v'_{GV}v'_G$ ne se superposent plus, d'autre part leur intensité est comparable à celle de $w'_{GW}w'_G$, indiquant une tendance vers l'isotropie dans le gaz. Les pics d'intensité des fluctuations $u'_{GU}u'_G$

atteignent parfois une valeur deux fois plus grande que celle de $w'_G w'_G$ principalement aux instants où intervient la coalescence. Ceci suggère que dans cette gamme de nombres de Reynolds, la coalescence intervient pour deux bulles qui sont plus ou moins dans le même plan horizontal plutôt que pour deux bulles qui sont l'une derrière l'autre.

Pour vérifier si nos résultats sont compatibles avec les données expérimentales, nous nous appuyons sur les mesures de *Garnier et al. 2002*. Ces derniers ont déterminé le taux de vide, la vitesse moyenne et les fluctuations de vitesse d'une suspension homogène de bulles dans la gamme de nombres de Reynolds $Re=300-500$, de nombres de Bond $Bo=1-2$ et de taux de vide $\alpha=0-0,3$. Soit U_R la vitesse moyenne de glissement des bulles et U_∞ la vitesse terminale de la bulle isolée de même diamètre. Pour un taux de vide $\alpha \approx 6,6\%$, ils obtiennent $(U_\infty - U_R)/U_\infty \approx 0,39$, $w'_L w'_L / U_R^2 \approx 0,08$ et $(w'_L w'_L / w'_G w'_G)^{1/2} = 0,7-1,1$. A $\tau=6,3$ notre simulation donne $U_R \approx 0,5 \text{ m/s}$. De plus, pour déterminer U_∞ nous avons réalisé une simulation axisymétrique de montée d'une bulle isolée dont le diamètre initial et les propriétés physiques sont les mêmes que ceux de la figure 4.40. On obtient une vitesse terminale U_∞ égale à $0,8 \text{ m/s}$ (attention, il ne s'agit pas d'eau et d'air et les bulles numériques sont beaucoup plus grosses que les bulles de l'expérience). En prenant comme valeur moyenne des fluctuations de vitesse dans le liquide $w'_L w'_L / dg \approx 0,27$ (figure 4.42a) et dans le gaz $w'_G w'_G / dg \approx 0,6$ (figure 4.42c), nous obtenons au total $(U_\infty - U_R)/U_\infty \approx 0,375$, $w'_L w'_L / U_R^2 \approx 0,106$ et $(w'_L w'_L / w'_G w'_G)^{1/2} = 0,67$. Ces valeurs sont tout fait comparables à celles trouvées par *Garnier et al. 2002* quand on tient compte du fait que les bulles intervenant dans les expériences sont légèrement contaminées.

A titre d'illustration, la simulation présentée ici a duré 9 jours sur une station Linux monoprocesseur Intel(R) Pentium(R) 4 CPU 3.00 GHz avec 2 Go de RAM. Soulignons que la taille du domaine de calcul définit la taille maximale des structures macroscopiques de l'écoulement et notamment celle de la distribution des bulles. Une étude exhaustive de ce paramètre est nécessaire afin d'évaluer son influence sur les propriétés statistiques de l'écoulement comme l'ont fait *Bunner & Tryggvason 2002* pour la gamme de nombres de Reynolds $Re=20-30$.

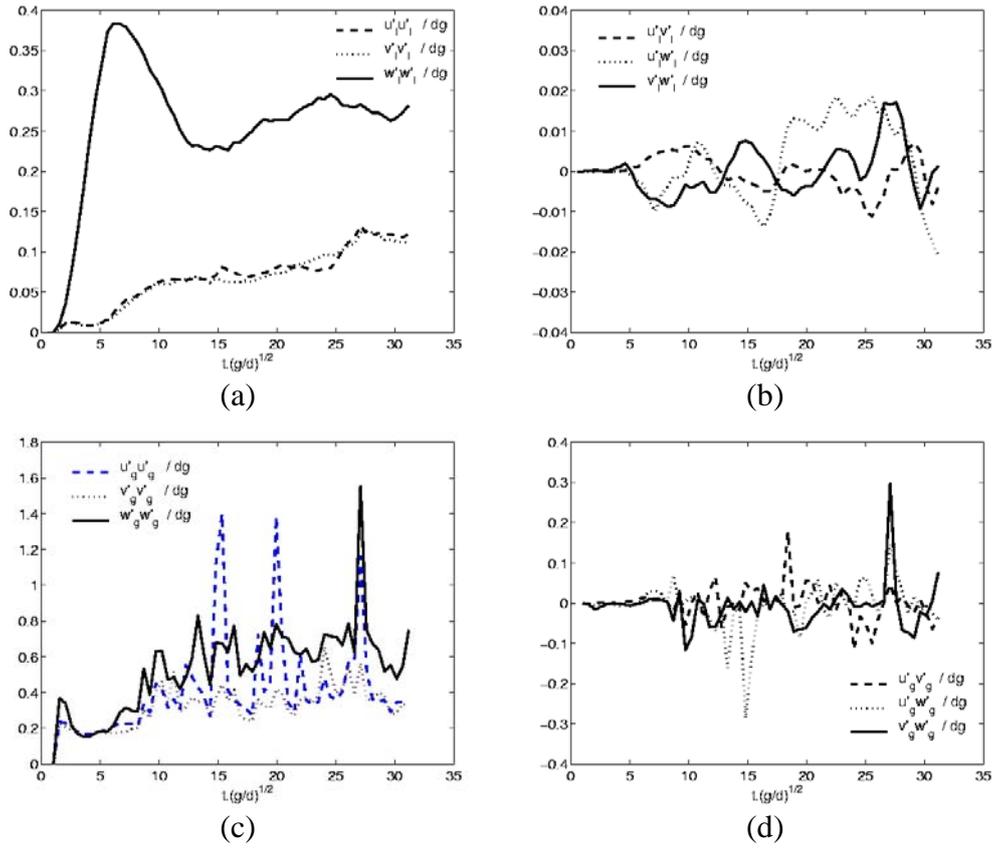


Figure 4.42: Composantes du tenseur de Reynolds. (a-b) dans le liquide. (c-d) dans le gaz.

Conclusion et perspectives

Ce travail s'inscrit dans le cadre d'une collaboration avec Arcelor Research et avait pour objectif de développer un outil prédictif de simulation d'écoulements di- et triphasiques complexes permettant de décrire la dynamique des écoulements intervenant dans le brassage de l'acier liquide en poche. Nous sommes partis pour cela d'un code mettant en œuvre une technique de suivi des interfaces sans reconstruction capable de traiter l'interaction de trois phases fluides avec présence d'effets capillaires entre chacune d'elles.

La première partie de ce travail est essentiellement numérique. L'objectif était de repousser les limitations qui empêchaient jusque là de simuler des phénomènes présentant des temps caractéristiques longs ou requérant d'atteindre un état quasi-stationnaire. Le schéma de transport de la fraction volumique ne permettait initialement pas de conserver les interfaces raides dans les zones où l'étirement est important, comme dans le sillage d'une bulle par exemple. Une analyse de l'origine de cet étalement nous a amenés à conclure que l'étalement venait du caractère épais de l'interface (étalée sur plusieurs cellules de calcul) dans le cas où elle est traversée par un champ local d'étirement. Nous avons proposé une méthode originale de transport de la fraction volumique de phase qui annule ou réduit significativement cet étirement dans les zones interfaciales et permet de conserver les interfaces raides au cours de la simulation tout en les laissant se déplacer librement. Les avantages et les potentialités de la méthode ont été démontrés sur de nombreux cas d'écoulements non uniformes et l'outil de simulation est à présent capable de décrire des phénomènes sur des temps longs. Le phénomène d'étalement ne subsiste que lorsque l'interface présente localement une importante courbure et que des filaments de fraction volumique étirés par l'écoulement atteignent une épaisseur critique de trois cellules de calcul. La seconde limitation de la version initiale du code venait de la non-conservation explicite de la masse, problème générique à de nombreuses méthodes de suivi d'interfaces. Nous avons montré que dans notre cas la raison en était l'étape de découplage de la résolution de l'équation de transport de la fraction volumique en sous-étapes unidimensionnelles. Nous avons proposé une méthode de modification locale de la fraction volumique qui permet de conserver la masse globale de chaque fluide à la précision souhaitée.

La seconde partie de ce travail a consisté à exploiter l'outil numérique ainsi amélioré pour dans un premier temps vérifier qu'il reproduit bien la physique des écoulements diphasiques sur des cas « connus ». Un effort important de validation a donc été fait de façon à bien définir les limites d'applications de cet outil. Nous avons vérifié par exemple que les contributions gravitaires et capillaires sont en bon accord avec les résultats théoriques, expérimentaux et numériques de référence. Nous avons montré de plus, et ceci est vrai pour toutes les méthodes de suivi d'interface, que les effets visqueux ne sont bien pris en compte que si le calcul de la viscosité de mélange tient compte de l'orientation de l'interface, sans quoi la propriété de raccordement des contraintes tangentielles ne peut être satisfaite. Par comparaison avec une approche de type « boundary-fitted », nous avons montré pour finir que notre outil numérique prend correctement en compte le couplage entre l'inertie et les autres contributions physiques, même si la couche limite au voisinage de

l'interface est résolue moins précisément. Avant de considérer des écoulements faisant intervenir un grand nombre d'inclusions (bulles ou gouttes), il nous a semblé raisonnable de vérifier que nous pouvions reproduire correctement les interactions entre deux inclusions. Les simulations de coalescence de deux bulles en ascension l'une derrière l'autre montrent un très bon accord avec les autres résultats numériques de la littérature. De même, les simulations de l'ascension de deux bulles sphériques l'une à côté de l'autre montrent que notre outil prédit correctement le changement de signe de la force d'interaction en fonction de la vitesse d'ascension des bulles. En outre, cette étude met en évidence le rôle du lissage de la fraction volumique intervenant dans le calcul de la force capillaire sur l'interaction des interfaces : plus le nombre de lissages est grand plus l'interaction et finalement la coalescence est favorisée. Nous montrons que la zone d'influence de la force capillaire, qui correspond initialement à la région interfaciale, gagne d'autant plus les régions voisines que le nombre de lissages est grand. Ce point reste à améliorer pour espérer s'affranchir de l'influence de ce paramètre numérique sur les phénomènes d'interaction. Nous avons aussi mis en évidence le fait que le temps d'apparition de la coalescence est influencé par la résolution spatiale dans la région de drainage du film liquide qui sépare deux interfaces proches l'une de l'autre. Ce problème est générique à toutes les méthodes qui suivent les interfaces sur un maillage fixe. Une première alternative est de raffiner localement les régions correspondant à la zone de drainage mais l'on s'oriente alors vers des procédures du type raffinement de maillage adaptatif et l'outil perd en simplicité d'utilisation. Pour garder à l'outil numérique son caractère « automatique », il sera dans la suite nécessaire d'introduire un modèle de sous-maille capable de reproduire la surpression engendrée par le rapprochement des interfaces et ainsi de compenser la faible résolution spatiale dans le film. Le temps auquel intervient la coalescence serait alors d'autant mieux contrôlé et bien moins dépendant des paramètres numériques.

La dernière partie de ce travail a concerné l'exploration de problèmes diphasiques relativement peu étudiés jusque là par voie numérique et comportant un intérêt particulier tant du point de vue fondamental qu'appliqué. Ces problèmes concernent la dynamique des écoulements à bulles et à gouttes, intervenant sur une gamme d'échelles de longueur allant de quelques micromètres à quelques centimètres.

Nous avons tout d'abord considéré l'hydrodynamique et les phénomènes de mélange intervenant dans des gouttes circulant dans un micro-canal dont le diamètre hydraulique est d'environ 50 μm . Les applications visées concernent le génie des procédés où les gouttes sont utilisées comme des micro-réacteurs individuels permettant de déterminer la cinétique des réactions chimiques. Lors de cette étude nous avons montré l'intérêt de la simulation numérique de ces écoulements en mettant en évidence les régions de recirculation de liquide au sein de la goutte qui sont responsables des limitations de l'efficacité du mélange. Simuler des écoulements diphasiques dont les échelles sont l'ordre de quelques dizaines de micromètres introduit une contrainte supplémentaire sur le pas de temps numérique : à chaque pas de temps les ondes capillaires ne doivent pas parcourir une distance supérieure à la taille de la cellule de calcul sous peine de divergence. A ces échelles les ondes vont très vite et réduisent le pas de temps à des valeurs de l'ordre de 10 nanosecondes. Heureusement, les phases transitoires sont très rapides et nous avons pu restreindre le temps physique à simuler à quelques millisecondes. Nous avons comparé les résultats des simulations bi- et tridimensionnelles

avec des mesures réalisées dans des micro-canaux par Flavie Sarrazin (Thèse LGC/Rhodia). Les vitesses et débits moyens calculés dans la phase porteuse et dans les gouttes sont en bon accord avec les mesures. Une comparaison fine du champ de vitesse local dans la goutte a été rendue possible grâce à des mesures de micro-vélocimétrie par imagerie de particules dont la résolution est de quelques microns. Les résultats numériques sont en excellent accord avec les mesures, ce qui suggère que notre outil de simulation est capable de décrire finement l'hydrodynamique de ces écoulements diphasiques. Il semble donc très souhaitable d'approfondir cette étude pour mieux comprendre les phénomènes intervenant à ces échelles et optimiser les procédés qui mettent en jeu ces écoulements.

Nous nous sommes ensuite penchés sur l'étude de la dynamique et de la topologie des bulles en ascension sous l'effet de la gravité, dont les applications directes concernent le brassage de l'acier liquide en poche dans l'industrie métallurgique. Une investigation détaillée a été réalisée pour déterminer la forme d'une bulle isolée dans des fluides allant des huiles extrêmement visqueuses à l'eau. Les formes de bulles obtenues sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et numériques de la littérature. Nous avons montré que dans la plage des grands nombres de Bond et de Reynolds la formation de calottes sphériques ou de bulles toriques est conditionnée d'une part par la forme initiale de la bulle, d'autre part par la résolution spatiale. L'étude de la dynamique non plus d'une seule bulle mais d'un nuage de bulles a enfin été abordée. Nous avons d'abord mené des simulations dans la gamme des nombres de Reynolds $Re=20-30$ de façon à comparer la dynamique du nuage calculé avec les résultats récents de *Esmaeeli & Tryggvason 1999* et *Bunner & Tryggvason 2002*. Durant les premiers temps de la simulation, les résultats obtenus sur les différentes grandeurs statistiques sont tout à fait comparables. Cependant dès que les perturbations engendrées par le mouvement des bulles destabilisent les trajectoires, les bulles se mettent à zigzaguer et nous observons de nombreuses coalescences. Ce n'est pas le cas chez *Esmaeeli & Tryggvason 1999* et *Bunner & Tryggvason 2002* car la description des interfaces dans leur méthode utilise des maillages mobiles dont les reconnections sont arbitrairement interdites. Dans la suite de nos simulations le nuage devient fortement inhomogène et la taille moyenne des bulles augmente. En étendant la gamme d'étude à des nombres de Reynolds de quelques centaines, nous observons le même type de comportement et nous mettons en évidence l'augmentation considérable avec le nombre de Reynolds de l'intensité des fluctuations de vitesse engendrées par le mouvement des bulles.

De très nombreuses perspectives à ce travail peuvent être envisagées. Sur le plan purement numérique, il apparaît nécessaire d'améliorer le traitement de la force capillaire. Bien que le modèle actuel permette de simuler précisément la dynamique des interfaces « isolées » (montée d'une bulle, déplacement d'une goutte, oscillation d'une surface libre, ...), il joue comme on l'a vu un rôle non négligeable dans l'interaction des interfaces quand celles-ci sont proches les unes des autres et que les effets capillaires sont dominants. Un deuxième aspect tout aussi important concerne la prise en compte du drainage du film liquide séparant deux interfaces se rapprochant l'une de l'autre. Ces deux points semblent primordiaux pour pouvoir étudier finement la dynamique d'un nuage dense de bulles évoluant à des nombres de Reynolds de plusieurs centaines et ainsi caractériser les lois de portance et de traînée actuellement mal connues dans cette gamme de paramètres. Un autre aspect

numérique qui pourrait avoir un impact non négligeable sur la précision avec laquelle les interfaces peuvent être suivies concerne la grille de résolution de l'équation de transport de C. En effet il est tout à fait envisageable (voir *Rudman 1998*) de résoudre le taux de présence sur une grille plus fine que les champs de vitesse et de pression. Ceci est d'autant plus vrai qu'il s'agit d'une équation scalaire, donc peu consommatrice de temps de calcul. On pourrait ainsi obtenir assez facilement des zones de transition de l'épaisseur d'une cellule de calcul. Par ailleurs, l'intégration des divers mécanismes physiques permettrait d'élargir le champ d'application de l'outil de simulation. On peut penser par exemple à la prise en compte des inhomogénéités de tension de surface présentes par exemple dans les écoulements qui sont le siège de réactions chimiques anisothermes.

Plus généralement deux grandes classes de phénomènes devraient être à brève échéance introduits dans le code. Il s'agit tout d'abord du changement de phase nécessaire pour simuler aussi bien les phénomènes d'ébullition que les phénomènes de transfert de matière aux interfaces induits par des réactions chimiques. Il s'agit bien sûr également de coupler au code existant une description des phénomènes turbulents permettant de simuler les grandes échelles d'écoulements diphasiques complexes. Ceci ne peut se faire sans une réflexion approfondie sur les contributions respectives aux différents types de transport des fluctuations turbulentes proprement dites et des fluctuations dues au mouvement propre des interfaces. Ces deux thèmes sont ou seront très prochainement étudiés en détail dans le groupe Interface. Enfin en termes de performance numérique, il est clair que la principale limitation actuelle du code est liée à son caractère vectoriel. Un travail mené par le service Cosinus de l'IMFT en lien avec notre équipe est en cours pour aboutir à la parallélisation du code...

Bibliographie

- Adalsteinsson D., Sethian J.A.,** The fast construction of extension velocities in level set methods, *J. Comput. Phys.* 148, 2–22 (1999)
- Adalsteinsson D., Sethian J.A.,** A fast level set method for propagating interfaces, *J. Comput. Phys.* 118, 269–277 (1995)
- Batchelor G.K.,** An introduction to fluid dynamics, Cambridge, Cambridge University Press (1967)
- Benkenida A.,** Développement et validation d'une méthode de simulation d'écoulements diphasiques sans reconstruction d'interfaces. Application à la dynamique des bulles de Taylor, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, Spécialité Mécanique des Fluides, Toulouse IMFT (1999)
- Benkenida A., Magnaudet J.,** Une méthode de simulation d'écoulements diphasiques sans reconstruction d'interfaces, *C. R. Acad. Sci. Sér. Iib*, 328, 25-32 (2000)
- Bhaga D., Weber M.E.,** Bubbles in viscous liquid: shapes, wakes and velocities, *J. Fluid Mech.* 105, 61–85 (1981)
- Billett S.J., Toro E.F.,** On WAF-type schemes for multidimensional hyperbolic conservation laws, *J. Comput. Phys.* 130, 1–24 (1997)
- Blanco Alvarez A.,** Quelques aspects de l'écoulement d'un fluide visqueux autour d'une bulle déformable : une analyse par simulation directe, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, Spécialité Mécanique des Fluides, Toulouse IMFT (1995)
- Blanco Alvarez A., Magnaudet J.,** The structure of the axisymmetric high Reynolds number flow around an ellipsoidal bubble of fixed shape, *Phys. Fluids*, 7, 1265–1274 (1995)
- Boris J.P., Book D.L.,** Flux-Corrected Transport : I. SHASTA, A Fluid transport algorithm that works, *J. Comput. Phys.* 18, 248–283 (1973)
- Brackbill J.U., Kothe D.B., Zemach C.,** A continuum method for modeling surface tension, *J. Comput. Phys.* 100, 335–354 (1992)
- Bunner B., Tryggvason G.,** Dynamics of homogeneous bubbly flows. Part 1. Rise velocity and microstructure of the bubbles, *J. Fluid Mech.* 466, 17-52 (2002)
- Bunner B., Tryggvason G.,** Effects of bubble deformation on the properties of bubbly flows, *J. Fluid Mech.* 495, 77-118 (2003)
- Calmet I.,** Analyse par simulation des grandes échelles des mouvements turbulents et du transfert de masse sous une interface plane, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, Spécialité Mécanique des Fluides, Toulouse IMFT (1995)
- Calmet I., Magnaudet J.,** Large eddy simulation of high-Schmidt-number mass transfer in a turbulent channel flow, *Phys. Fluids*, 9, 438-455 (1997)
- Calmet I., Magnaudet J.,** Statistical structure of high-Reynolds-number turbulence close to the free surface of an open-channel flow, *J. Fluid Mech.* 474, 355-378 (2003)
- Chang Y.C., Hou T.Y., Merriman B., Osher S.,** A level set formulation of Eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows, *J. Comput. Phys.* 124, 449-464 (1996)
- Chen L., Garimella S.V., Reizes J.A., Leonardi E.,** The development of a bubble rising in a viscous liquid, *J. Fluid Mech.* 387, 61-96 (1999)

- Clift R., Grace J.R., Weber M.E.,** Bubbles Drops and Particules, Academic Press, New York (1978)
- Climent E.,** Dispersion de bulles et modification du mouvement de la phase porteuse dans des écoulements tourbillonnaires, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, Spécialité Mécanique des Fluides, Toulouse IMFT (1996)
- Climent E., Magnaudet J.,** Large scale simulation of bubble-induced convection, *Phys. Rev. Lett.*, 82, 4827-4830 (1999)
- Coward A.V., Renardy Y.Y., Renardy M., Richards J.R.,** Temporal evolution of periodic disturbances in two-layer Couette flow, *J. Comput. Phys.* 132, 346-361 (1997)
- Cranga J.,** Simulation numérique directe d'écoulements di- et tri-phasiques engendrés par l'injection de bulles dans un bain de métal liquide, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, Spécialité Mécanique des Fluides, Toulouse IMFT (2002)
- Crapper G.D.,** Introduction to water waves, Wiley, New York, (1984)
- De Gennes P.-G., Brochard-Wyart F., Quéré D.,** Gouttes, bulles, perles et ondes, Collection Echelles, Belin (2002)
- De Sousa F.S., Mangiavacchi N., Nonato L.G., Castelo A., Tomé M.F., Ferreira V.G., Cuminato J.A. McKee S.,** A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3D multi-fluid flows with free surfaces, *J. Comput. Phys.* 198, 469-499 (2004)
- DeBar R.,** Fundamentals of the KRAKEN code. Tech. Rep. UCIR-760. Lawrence Livermore Nat. Lab. (1974)
- DeVore C.R.,** An improved limiter for multidimensional flux corrected transport, Laboratory for Computational Physics and Fluid Dynamics, Naval Research Laboratory, Washington, DC 20375-5344 (1998)
- Duineveld P.C.,** Bouncing and coalescence of two bubbles in water, Thèse de l'Université de Twente, Pays Bas, ISBN 90-9007541-0, (1994)
- Duineveld P.C.,** The rise velocity and shape of bubbles in pure water at high Reynolds number, *J. Fluid Mech.* 292, 325-332 (1995)
- Enright D., Fedkiw R.P., Ferziger J., Mitchell I.,** A hybrid particle-level set method for improved interface capturing, *J. Comput. Phys.* 183, 83-116 (2002)
- Esmaceli A., Tryggvason G.,** Direct numerical simulations of bubbly flows. Part 2. Moderate Reynolds number arrays, *J. Fluid Mech.* 385, 325-358 (1999)
- Garnier C., Lance M., Marié J.L.,** Measurement of local flow characteristics in buoyancy-driven bubbly flow at high void fraction, *Exp. Therm. Fluid Sci.* 26, 811-815 (2002)
- Ghidersa B.E., Wörner M., Cacuci D.G.,** Exploring the flow of immiscible fluids in a square vertical mini-channel by direct numerical simulation, *Chem. Eng. J.* 101, 285-294 (2004)
- Gomes J., Faugeras O.,** Reconciling distance functions and level sets, *J. Vis. Commun. Image R.* 11, 209-223 (2000)
- Gueyffier D., Li J., Nadim A., Scardovelli R., Zaleski S.,** Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows, *J. Comput. Phys.* 152, 423-456 (1999)
- Harlow F.H., Welch J.E.,** Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface, *Phys. Fluids* 8, 2182-2189 (1965)
- Harten A.,** High resolution schemes for hyperbolic conservation laws, *J. Comput. Phys.* 49, 357-393 (1983)
- Harten A., Engquist B., Osher S., Chakravarthy S.R.,** Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III, *J. Comput. Phys.* 71, 231-303 (1987)

- Hirt C.W., Nichols B.D.,** Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, *J. Comput. Phys.* 39, 201–225 (1981)
- Holdych D.J., Georgiadis J.G., Buckius R.O.,** Hydrodynamic instabilities of near-critical CO₂ flow in microchannels : Lattice Boltzmann simulation, *Phys. Fluids*, 16, No. 5, 1791-1802 (2004)
- Hubbard M.E.,** Adaptive Mesh Refinement for three-dimensional off-line tracer advection over the sphere, *Int. J. Numer. Meth. Fl.* 40, 369–377 (2002)
- Inamuro T., Ogata T., Tajima S., Konishi N.,** A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences, *J. Comput. Phys.* 198, 628-644 (2004)
- Jacqmin D.,** Calculation of two-phase Navier–Stokes flows using phase-field modeling, *J. Comput. Phys.* 155, 96–127 (1999)
- Jameson L.,** AMR vs high order schemes, *SIAM J. Sci. Comput.* 18, No.1 (2003)
- Jamet D., Lebaigue O., Coutris N., Delhay J.M.,** The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid–vapor flows with phase change, *J. Comput. Phys.* 169, 624–651 (2001)
- Jiang G.S., Peng D.,** Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations, *SIAM J. Sci. Comput.* 21, No. 6, 2126-2143 (2000)
- Jiang G.S., Shu C.W.,** Efficient implementation of Weighted ENO schemes, *J. Comput. Phys.* 126, 202–228 (1996)
- Juric D., Tryggvason G.,** Computation of boiling flows, *Int. J. Multiphas. Flow* 24, No. 3, 387-410 (1998)
- Kamp A.M., Chesters A.K., Colin C., Fabre J.,** Bubble coalescence in turbulent flows : a mechanistic model for turbulence-induced coalescence applied to microgravity bubbly pipe flow, *Int. J. Multiphas. Flow* 27, 1363-1396 (2001)
- Kok J.B.W.,** Dynamics of a pair of gas bubbles moving through liquid. Part I. Theory., *Eur. J. Mech. B-Fluid* 12, 515-540 (1993)
- Lafaurie B., Nardone C., Scardovelli R., Zaleski S., Zanetti G.,** Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER, *J. Comput. Phys.* 113, 134-147 (1994)
- Lamb H.,** *Hydrodynamics*, 6th edition, Cambridge University Press (1932)
- Legendre D.,** Quelques aspects des forces hydrodynamiques et des transferts de chaleur sur une bulle sphérique, Thèse de l’Institut National Polytechnique de Toulouse, Spécialité Mécanique des Fluides, Toulouse IMFT (1996)
- Legendre D., Boree J., Magnaudet J.,** Thermal and dynamical evolution of a spherical bubble moving steadily in a superheated or subcool liquid, *Phys. Fluids*, 10, 1256-1272 (1998)
- Legendre D., Magnaudet J.,** The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow, *J. Fluid Mech.*, 368, 81-126 (1998)
- Legendre D., Magnaudet J., Mougin G.,** Hydrodynamic interactions between two spherical bubbles rising side by side in a viscous liquid, *J. Fluid Mech.* 497, 133-166 (2003)
- LeVeque R.,** High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow, *SIAM J. Numer. Anal.* 33, 627-665 (1996)
- Li J.,** Calcul d’interface affine par morceaux, *C. R. Acad. Sci. Sér. IIb*, 320, 391-396 (1995)
- Lörstad D., Fuchs L.,** High-order surface tension VOF-model for 3D bubble flows with high density ratio, *J. Comput. Phys.* 200, 153-176 (2004)
- Magnaudet J., Rivero M., Fabre J.,** Accelerated flows past a rigid sphere or a spherical bubble. Part.I : Steady straining flow, *J. Fluid Mech.*, 284, 97-135 (1995)

- Martin J.C., Noyce W.J.**, Transactions of the Philosophical Society of London, Vol. 244, p. 312 (1953)
- Merle A.**, Effets de la turbulence sur l'hydrodynamique d'une bulle sphérique, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, Spécialité Mécanique des Fluides, Toulouse IMFT (2004)
- Merle A., Legendre D., Magnaudet J.**, Forces on a high-Reynolds-number spherical bubble in a turbulent flow, *J. Fluid Mech.*, 532, 53-62 (2005)
- Moore D.W.**, The velocity of rise of distorted gas bubbles in a liquid of small viscosity, *J. Fluid Mech.*, 23, 749-766 (1965)
- Mougin G., Magnaudet J.**, Path instability of a rising bubble, *Phys. Rev. Lett* 88, 014502 (2001)
- Muradoglu M., Stone H.A.**, Mixing in a drop moving through a serpentine channel : A computational study, *Phys. Fluids* 17, 073305 (2005)
- Oka H., Ishii K.**, Numerical analysis on the motion of gas bubbles using level set method, *J. Phys. Soc. Jpn.* 68, 823-832 (1999)
- Olsson E., Kreiss G.**, A conservative level set method for two phase flow, *J. Comput. Phys.* 210, 225-246 (2005)
- Osher S., Fedkiw R.P.**, Level set methods: An overview and some recent results, *J. Comput. Phys.* 169, 463-502 (2001)
- Osher S., Sethian J.A.**, Front propagating with curvature dependent speed : algorithms based on Hamilton-Jacobi formulation, *J. Comput. Phys.* 79, page 12 (1988)
- Peyret R., Taylor T.**, Computational methods for fluid flow, Springer-Verlag (1983)
- Popinet S., Zaleski S.**, A front tracking algorithm for accurate representation of surface tension, *Int. J. Numer. Meth. Fl.* 30, 775-793 (1999)
- Prosperetti A.**, Free oscillations of drops and bubbles : the initial value problem., *J. Fluid Mech.* 100, 333-347 (1980)
- Rayleigh, Lord**, On the capillary phenomena of jets, *Proc. R. Soc. Lond.* 29, 71-97 (1879)
- Renardy M., Renardy Y., Lie J.**, Numerical simulation of moving contact line problems using a volume of fluid method, *J. Comput. Phys.* 171, 243-263 (2001)
- Rider W.J., Kothe D.B.**, Reconstructing volume tracking, *J. Comput. Phys.* 141, 112-152 (1998)
- Rivero M.**, Etude pas simulation numérique des forces exercées sur une inclusion sphérique par un écoulement accéléré, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, Spécialité Mécanique des Fluides, Toulouse IMFT (1991)
- Rudman M.**, Volume-tracking methods for interfacial flow calculations, *Int. J. Numer. Meth. Fl.* 24, 671-691 (1997)
- Rudman M.**, A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations, *Int. J. Numer. Meth. Fl.* 28, 357-378 (1998)
- Ryskin G., Leal L.G.**, Numerical solution of free boundary problems in fluid mechanics, *J. Fluid Mech.* 148, 1-43 (1984)
- Sangani A.S., Acrivos A.**, Slow flow past periodic arrays of cylinders with application to heat transfer, *Int. J. Multiphas. Flow* 8, 193-206 (1982)
- Sangani A.S.**, Sedimentation in ordered emulsions of drops at low Reynolds numbers, *J. Appl. Math. Phys. (ZAMP)* 38, 542-556 (1987)

- Sangani A.S., Didwania A.K.,** Dynamic simulation of flows of bubbly liquids at large Reynolds numbers, *J. Fluid Mech.* 250, 307–437 (1993)
- Sankaranarayanan K., Shan X., Kevrekidis I.G., Sundaresan S.,** Analysis of drag and virtual mass forces in bubbly suspensions using an implicit formulation of the lattice Boltzmann method, *J. Fluid Mech.* 452, 61–96 (2002)
- Santiago J.G., Wereley S.T., Meinhart C.D., Beebe D.J., Adrian R.J.,** A particle image velocimetry system for microfluidics, *Exp. Fluids* 25, 316–319 (1998)
- Sarrazin F., Prat L., Casamatta G., Gourdon C., Joanicot M.,** Mixing characterisation in micro-drops, 7th World Congress of Chemical Engineering, Glasgow, (2005)
- Scardovelli R., Zaleski S.,** Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 31, 567–603 (1999)
- Sethian J.A.,** Evolution, implementation, and application of level set and fast marching methods for advancing fronts, *J. Comput. Phys.* 169, 503–555 (2001)
- Sethian J.A.,** Fast marching methods, *SIAM Review* 41, 199–235 (1999)
- Shin S., Juric D.,** Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity, *J. Comput. Phys.* 180, 427–470 (2002)
- Shu C.W., Osher S.,** Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II, *J. Comput. Phys.* 83, 32–78 (1998)
- Smereka P.,** On the motion of bubbles in a periodic box, *J. Fluid Mech.* 254, 79–112 (1993)
- Song H., Tice J.D., Ismagilov R.,** A microfluidics system for controlling reaction networks in time, *Angew. Chem. Int. Ed.* 42, 768–772 (2003)
- Spelt P.D.M.,** A level set approach for simulations of flows with multiple moving contact lines with hysteresis, *J. Comput. Phys.* 207, 389–404 (2005)
- Stiriba Y.,** A nonlinear flux split method for hyperbolic conservation laws, *J. Comput. Phys.* 176, 20–39 (2002)
- Stone H.A., Stroock A.D., Ajdari A.,** Engineering flows in small devices : microfluidics toward lab-on-a-chip, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 36, 381–411 (2004)
- Sussman M., Smereka P.,** Axisymmetric free boundary problems, *J. Fluid Mech.* 341, 269–294 (1997)
- Sussman M., Fatemi E., Smereka P., Osher S.,** An improved level set method for incompressible two-phase flows, *Comput. Fluids* Vol. 27, pp. 663–680 (1998)
- Sussman M., Almgren A.S., Bell J.B., Colella P., Howell L.H., Welcome M.L.,** An adaptive level set approach for incompressible two-phase flows, *J. Comput. Phys.* 148, 81–124 (1999)
- Sussman M., Puckett E.G.,** A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows, *J. Comput. Phys.* 162, 301–337 (2000)
- Sweby P.,** High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws, *SIAM J. Numer. Anal.* 21, 995–1011 (1984)
- Takemura F., Magnaudet J.,** The transverse force on a clean or contaminated bubble rising near a vertical wall at moderate Reynolds number, *J. Fluid Mech.* 495, 235–253 (2003)
- Torres D.J., Brackbill J.U.,** The point-set method: front-tracking without connectivity, *J. Comput. Phys.* 165, 620–644 (2000)

- Unverdi S., Tryggvason G.,** A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flows, *J. Comput. Phys.* 100, 25–37 (1992)
- Vincent S., Caltagirone J.P.,** Efficient solving methods for unsteady incompressible flow problems, *Int. J. Numer. Meth. Fl.* 30, 795-811 (1999)
- Walters J.K., Davidson J.F.,** The initial motion of a gas bubble formed in an inviscid liquid. Part 2. The three-dimensional bubble and the toroidal bubble, *J. Fluid Mech.* 17, 321-336 (1963)
- Welch S.W.J., Wilson J.,** A volume of fluid based method for fluid flows with phase change, *J. Comput. Phys.* 160, 662–682 (2000)
- Yee H.C.,** Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications, *J. Comput. Phys.* 68, 151-179 (1987)
- Youngs D.L.,** Time dependent multi-material flow with large fluid distortion, *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, K.W. Morton & M.J. Baynes eds., Academic, New York, 273-285 (1982)
- Yuan H., Prosperetti A.,** On the line motion of two spherical bubbles in a viscous flow, *J. Fluid Mech.* 278, 325–349 (1994)
- Zalesak S.T.,** Fully multidimensional Flux-Corrected Transport algorithms for fluids, *J. Comput. Phys.* 31, 335–362 (1979)
- Zhao H.K., Chan T., Merriman B., Osher S.,** A variational level set approach to multiphase motion, *J. Comput. Phys.* 127, 179–195 (1996)
- Zhou H., Pozrikidis C.,** The flow of ordered and random suspensions of two-dimensional drops in a channel, *J. Fluid Mech.* 255, 103–127 (1993)