

Titre: Modélisation numérique de problèmes de transition de phase en
Title: mécanique des fluides par la méthode des éléments finis

Auteur: Daniel Lévesque
Author:

Date: 2016

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Lévesque, D. (2016). Modélisation numérique de problèmes de transition de
Citation: phase en mécanique des fluides par la méthode des éléments finis [Master's
thesis, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.
<https://publications.polymtl.ca/2365/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/2365/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:** Steven Dufour
Advisors:

Programme: Maîtrise recherche en génie industriel
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION NUMÉRIQUE DE PROBLÈMES DE TRANSITION DE PHASE EN
MÉCANIQUE DES FLUIDES PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS

DANIEL LÉVESQUE
DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET DE GÉNIE INDUSTRIEL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES)
NOVEMBRE 2016

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MODÉLISATION NUMÉRIQUE DE PROBLÈMES DE TRANSITION DE PHASE EN
MÉCANIQUE DES FLUIDES PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS

présenté par : LÉVESQUE Daniel

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

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

M. SAUCIER Antoine, Ph. D., président

M. DUFOUR Steven, Ph. D., membre et directeur de recherche

M. VÉTEL Jérôme, Doctorat, membre

DÉDICACE

À ma mère.

REMERCIEMENTS

J'aimerais remercier du fond du cœur mon directeur de recherche, le professeur Steven Dufour, pour m'avoir donné l'opportunité de travailler sur ce projet tout en me permettant d'explorer autant d'idées. Ses suggestions, ses commentaires, son soutien et sa patience ont été une ressource indispensable des plus formatrice et je lui en suis très reconnaissant.

Je tiens à remercier monsieur Wissem Mazoun et monsieur Yann-Meing Law-Kam Cio pour leur soutien, leur disponibilité et leurs encouragements. Messieurs, sans vous, le labo n'aurait pas été le labo.

Je présente aussi mes sincères remerciements à monsieur Antoine Saucier pour avoir accepté d'être le président du jury, ainsi qu'à monsieur Jérôme Vétel pour avoir accepté d'être membre du jury.

J'exprime aussi ma profonde reconnaissance envers monsieur Donatien N'dri pour son soutien et ses précieux conseils dans mon apprentissage de l'enseignement.

Un gros merci au personnel du département qui a fait de mon passage à Polytechnique une expérience plus qu'agréable.

Je veux aussi dire à quel point j'ai été chanceux de pouvoir compter sur l'appui d'une mère exceptionnelle qui ne cesse de m'inspirer.

RÉSUMÉ

On présente un modèle pour le phénomène de transition de phase, basé une méthode eulérienne de capture de l'interface dans le cadre d'une discrétisation à l'aide de la méthode des éléments finis. Ce modèle est applicable aux écoulements multifluides où les phases sont incompressibles et immiscibles. Une technique de calcul et de représentation des flux d'énergie est développée et analysée. Le module développé est vérifié à l'aide d'un problème qui représente l'ébullition dans l'espace à une dimension et qui est étendu dans l'espace à trois dimensions. Des pistes sont proposées pour poursuivre et améliorer le modèle présenté.

ABSTRACT

We develop and implement a model for liquid-vapor phase change in the case of non-miscible and incompressible fluids. We use a finite element method to discretize the problem and an Eulerian marker to represent the liquid-vapor interface. A technique is developed and analysed to compute and represent energy fluxes during the phase transition. The implemented code is verified by solving a simple one dimensional boiling problem extended in three dimensional space. Suggestions are made to guide further studies of this problem.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vi
TABLE DES MATIÈRES	vii
LISTE DES TABLEAUX	ix
LISTE DES FIGURES	x
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xii
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Description du phénomène de transition de phase	1
1.2 Objectifs	3
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	4
2.1 Écoulements multiphases	4
2.2 Écoulements multiphases avec transition de phase	6
CHAPITRE 3 MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS À SURFACE LIBRE AVEC TRAN-	
SITION DE PHASE	8
3.1 Représentation d'un écoulement à surface libre	8
3.1.1 Surface libre	8
3.1.2 La pseudo-concentration	9
3.1.3 Courbure de l'interface et régularité de la pseudo-concentration	12
3.2 Lois de conservation	12
3.2.1 Conservation de la masse	12
3.2.2 Conservation de la quantité de mouvement	14
3.2.3 Conservation de l'énergie thermique	15
3.3 Équation de transport de l'interface	16

3.4	Système d'équations aux dérivées partielles (EDP) incompressible avec transition de phase	17
3.5	Modèle de transition de phase	19
3.5.1	Vitesse de l'interface	20
3.5.2	Expression du flux d'énergie	21
3.5.3	Système d'EDP final	22
3.5.4	Formes adimensionnelles	23
3.6	Méthode de calcul du flux d'énergie	24
3.6.1	Évaluation du flux d'énergie à l'interface entre les fluides	25
3.6.2	Évaluation de la divergence non nulle du champ de vitesse	26
3.6.3	Calcul du flux d'énergie à travers la zone de transition	26
3.7	Conclusion	27
CHAPITRE 4 DISCRÉTISATION DU PROBLÈME		30
4.1	Espaces fonctionnels	30
4.2	Formes faibles	32
4.3	Discrétisation	33
4.4	Stabilisation	35
CHAPITRE 5 PROBLÈME D'ÉBULLITION AVEC SOLUTION EXACTE		36
5.1	Principes théoriques et caractéristiques de la solution	36
5.2	Solution exacte	38
5.3	Résultats et discussion	39
5.3.1	Paramètres de la solution	39
5.3.2	Analyse des données	39
CHAPITRE 6 CONCLUSION		45
6.1	Synthèse des travaux	45
6.2	Limitations de la solution proposée et pistes de solutions	45
6.3	Développements futurs	46
RÉFÉRENCES		48

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1	Adimensionnalisation.	23
Tableau 5.1	Intégration numérique des termes de flux d'énergie et de divergence du champ de vitesse à travers la zone de transition.	41

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Représentation 2D de l'ébullition. On voit l'évolution d'une bulle de vapeur, qui prend naissance dans une inclusion située dans la surface du fond chauffé. L'évolution de l'interface entre la phase vapeur et la phase liquide est délimitée par un trait en pointillé.	2
Figure 3.1	Représentation 2D d'une surface libre liquide-vapeur.	9
Figure 3.2	Représentation 2D de la zone de transition qui contient l'interface entre les fluides.	10
Figure 3.3	Représentation 1D de la pseudo-concentration.	11
Figure 3.4	Représentation 2D de la couche d'éléments qui recouvre l'interface où on définit un flux constant par élément.	25
Figure 3.5	Pour évaluer le flux d'énergie $-k\nabla T(\mathbf{x}_s, t)$ à l'interface, on sonde la température de part et d'autre de l'interface pour obtenir $T(\mathbf{x}_s \pm \epsilon \mathbf{n}_s, t)$	26
Figure 3.6	Reconstruction de l'interface à l'extérieur de la zone de transition.	27
Figure 3.7	Représentation 2D des éléments qui recouvrent la zone de transition entre les fluides. À partir d'un élément qui recouvre l'interface où on a défini un flux d'énergie, on étend cette valeur à tous les autres éléments de la zone de transition dans la direction normale à l'interface.	28
Figure 3.8	Représentation 1D du lissage du terme de flux d'énergie \dot{q} défini à l'interface. On voit une coupe de la zone de transition dans la direction normale à l'interface. La courbe lissée est représentée en trait discontinu. Le saut est représenté en pointillé.	28
Figure 5.1	Représentation 2D de l'ébullition unidimensionnelle. L'interface entre la phase vapeur et la phase liquide est en trait pointillé.	36
Figure 5.2	Représentation des conditions aux frontières du problème d'ébullition. L'interface entre la phase vapeur et la phase liquide est délimitée par un trait en pointillé.	37
Figure 5.3	Maillage structuré constitué de $81 \times 5 \times 5$ nœuds géométriques.	39
Figure 5.4	Graphes au temps $t = 1,00$ s (a) de la température T , (b) de la pseudo-concentration F , (c) du flux d'énergie \dot{q} , (d) de la divergence du champ de vitesse $\nabla \cdot \mathbf{u}$, (e) du champ de vitesse \mathbf{u} et (f) de la pression p à travers le domaine, dans la direction de sortie du fluide. Ces données sont celles qu'on observe en suivant une ligne de courant qui prend la forme d'une droite, soit dans la direction de $\mathbf{n}_s = (1, 0, 0)$	40

Figure 5.5	Graphes de (a) la composante en vitesse u et (b) la température T en fonction du temps à la sortie du domaine.	42
Figure 5.6	Graphes de l'erreur relative de (a) la vitesse u et (b) la température T en fonction du temps à la sortie du domaine à partir du temps $t = 0,5$ s. On ne présente pas les données dans les autres directions $((0, 1, 0)$ et $(0, 0, 1))$ puisqu'elles ne sont pas significatives.	42
Figure 5.7	Analyse de convergence sur u pour $h_1 = \frac{1}{80}$, $h_2 = \frac{1}{160}$ et $h_3 = \frac{1}{320}$. La fonction $f(h) = h^2$ est ajoutée en référence pour illustrer une convergence quadratique.	43

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

EDP	: équations aux dérivées partielles
SUPG	: « streamline upwind/Petrov-Galerkin »
Re	: nombre de Reynolds
Pe	: nombre de Péclet
Ja	: nombre de Jacobi
Fr	: nombre de Froude
We	: nombre de Weber
∇	: opérateur gradient
D/Dt	: dérivée matérielle
d/dt	: dérivée totale
$\partial/\partial t$: dérivée partielle par rapport au temps
δ	: delta de Kronecker
\mathbf{u}	: champ de vitesse
p	: pression
T	: température du fluide
F	: pseudo-concentration
τ	: tenseur des contraintes
$\dot{\gamma}(\mathbf{u})$: tenseur du taux de déformation
ρ	: masse volumique du fluide
ρ_v	: masse volumique de la phase vapeur
ρ_ℓ	: masse volumique de la phase liquide
μ	: viscosité du fluide
Ω	: domaine de calcul
$\partial\Omega$: frontière du domaine de calcul
Ω_v	: domaine de calcul de la phase vapeur
Ω_ℓ	: domaine de calcul de la phase liquide
S	: interface entre les phases
Ω_ϵ	: zone de transition
ϵ	: demi-largeur de la zone de transition
\mathbf{x}_s	: position de l'interface
\mathbf{u}_s	: champ de vitesse de l'interface
\mathbf{n}_s	: normale à l'interface
\mathbf{t}_s	: vecteur du plan tangent à l'interface

\mathbf{u}_v	: champ de vitesse de la phase vapeur
\mathbf{u}_ℓ	: champ de vitesse de la phase liquide
\mathbf{v}	: champ de vitesse de transition de phase
f_C	: force capillaire
f_{CV}	: approximation volumique de la force capillaire
γ	: coefficient de tension superficielle
κ	: courbure locale de l'interface
\mathbf{g}	: force gravitationnelle
C	: conductivité thermique à volume constant
L	: chaleur latente
k	: diffusivité thermique
T_{sat}	: température de saturation
\dot{q}	: flux d'énergie thermique
\dot{m}	: flux de masse
\dot{q}_v	: flux d'énergie thermique dans la phase vapeur
\dot{q}_ℓ	: flux d'énergie thermique dans la phase liquide

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Le phénomène de transition de phase est présent dans plusieurs procédés industriels. Tout procédé qui transporte de l'énergie sous forme thermique ou cinétique via un fluide est susceptible de produire une transition de phase. On peut prendre en exemple le système de refroidissement d'une centrale nucléaire ou la production d'électricité à l'aide d'une turbine hydraulique.

Les simulations numériques permettent d'atteindre un certain niveau de connaissances sur le déroulement d'un phénomène physique sans avoir à conduire les expériences en laboratoire ou en industrie. On peut voir l'approche numérique comme un complément expérimental qui permet de diminuer les coûts et le nombre d'expériences à effectuer en déterminant de manière préliminaire les paramètres et les caractéristiques des composantes à utiliser. À une époque où les ressources informatiques sont de plus en plus présentes et performantes, il est très avantageux de tirer profit de ces progrès pour économiser temps, argent, ressources et risques liés à l'expérimentation. Ces progrès ouvrent aussi la porte à un nouveau genre d'expérimentation où il est maintenant possible d'explorer des modèles physiques complexes. Tel est le cas pour l'étude des transitions de phase.

1.1 Description du phénomène de transition de phase

Une transition de phase se produit lorsque la matière n'arrive plus à emmagasiner l'énergie dans sa phase actuelle, qu'elle soit solide, liquide ou gazeuse. À ce moment, l'énergie supplémentaire sert à modifier la structure interne de la phase en changeant sa configuration. Dans sa nouvelle forme, la matière peut soit emmagasiner plus d'énergie ou adopter une configuration qui est plus stable. La température à laquelle ce phénomène se produit est la température de saturation (T_{sat}) et elle varie selon les conditions auxquelles est soumise la matière.

Pour un fluide, une transition de phase peut survenir sous deux formes :

1. L'ébullition ou l'évaporation, où la phase liquide passe vers la phase vapeur ;
2. La condensation, où la phase vapeur passe vers la phase liquide.

La physique de ces deux phénomènes est la même et on décrit ici le cas de l'ébullition à titre d'exemple.

L'ébullition d'un liquide se produit lorsqu'il est chauffé jusqu'à sa température de saturation T_{sat} . Cette température est aussi connue sous le nom de *température d'ébullition*. À ce stade, la température cesse d'augmenter dans le liquide et il passe à l'état vapeur. Cette transition de phase a lieu à l'interface entre les phases. Une très grande énergie est nécessaire pour que les bulles de vapeur apparaissent dans le liquide sans qu'une interface ne soit déjà présente. De plus, un évènement phy-

sique doit se produire à cet endroit dans le fluide (source de chaleur intense, passage d'une particule à très grande énergie, etc.) pour donner naissance à cette bulle de vapeur. Il doit donc y avoir une interface liquide-vapeur pour que le phénomène ait lieu. En pratique, cette interface est présente aux limites du domaine où le liquide est en contact avec une autre surface. Par exemple, quand on fait bouillir de l'eau dans une casserole, le fond de celle-ci contient de minuscules inclusions où est piégé de l'air quand on la remplit d'eau. On peut facilement voir l'emplacement de ces petites inclusions lorsqu'on fait chauffer de l'eau, car l'air qui s'y trouve prend de l'expansion lorsqu'il est chauffé et de petites bulles deviennent visibles avant que le liquide ne bout. Ces inclusions sont des *sites de nucléation*. Pendant l'ébullition, les bulles de vapeur se forment aux sites de nucléation et deviennent de plus en plus grandes. Ces bulles finissent par se détacher pour remonter à la surface du liquide. Une couche de vapeur peut complètement recouvrir la surface lorsqu'elle est suffisamment chauffée. La quantité de liquide diminue au profit de la quantité de vapeur pendant l'ébullition, et de l'énergie est absorbée pour permettre cette transformation d'avoir lieu. La figure 1.1 illustre une transition de phase, dans le cas de l'ébullition, comme on vient de la décrire.

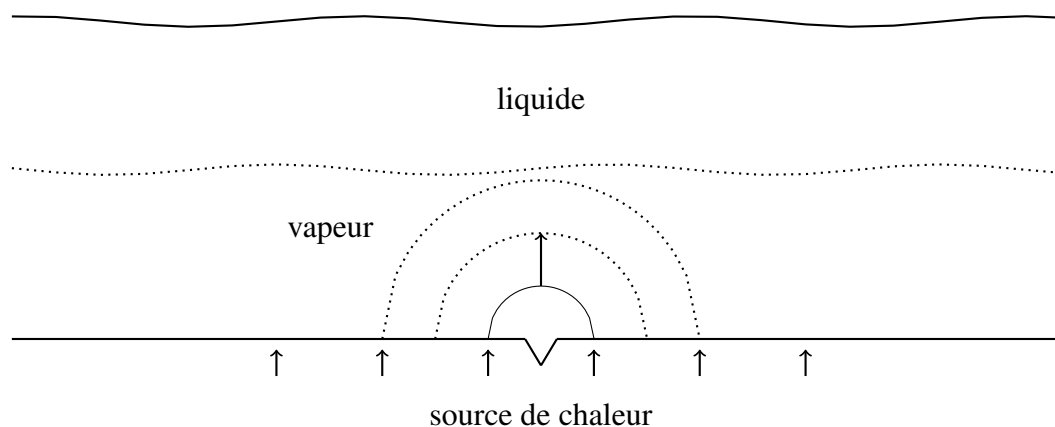


Figure 1.1 Représentation 2D de l'ébullition. On voit l'évolution d'une bulle de vapeur, qui prend naissance dans une inclusion située dans la surface du fond chauffé. L'évolution de l'interface entre la phase vapeur et la phase liquide est délimitée par un trait en pointillé.

Lors de l'ébullition, la température de la phase vapeur peut s'élever au-dessus de la température d'ébullition, ce qui n'est pas le cas pour la phase liquide. Si une couche de vapeur recouvre la surface chauffée, la phase liquide est chauffée par l'intermédiaire de la phase vapeur. Ceci a pour effet de permettre à la surface d'atteindre de plus grandes températures que si elle était encore en contact avec le liquide. Cette situation risque d'endommager la surface. Aussi, comme la phase vapeur conduit moins bien la chaleur que la phase liquide, la chaleur est transportée de manière moins efficace, de la surface vers le fluide. Ces caractéristiques d'une transition de phase nous motivent donc à construire des modèles qui nous aideront à mieux comprendre le phénomène.

1.2 Objectifs

Dans les travaux présentés, on s'intéresse à la transition entre les phases liquide et gazeuse d'un fluide. On se place ainsi dans le contexte d'un écoulement multiphase, où les surfaces libres sont soumises à une dynamique complexe, et où le transfert d'énergie et de matière entre les phases domine la dynamique de l'écoulement. En se basant sur les travaux de Dufour (1999) et Rivard (2012), on propose d'utiliser la méthode des éléments finis avec capture eulérienne de l'interface entre les fluides.

L'avantage de l'approche proposée ici est la simplicité avec laquelle on peut représenter un écoulement multiphase complexe. Contrairement aux méthodes lagrangiennes de suivi d'interface où l'on doit traiter celle-ci explicitement et séparément du système d'équations qui modélise l'écoulement, les méthodes eulériennes permettent de traiter tout le problème à l'aide d'un seul ensemble d'équations. De plus, l'interface est traitée de manière implicite, ce qui permet à son évolution d'être complètement dictée par le système d'équations utilisé. Cette différence permet une gestion beaucoup plus naturelle de la topologie de la surface libre dans l'écoulement.

L'objectif principal du projet de recherche est de développer un modèle numérique pour décrire et étudier les phénomènes de transition de phase présents dans les écoulements multifluides, basé sur une méthode de capture eulérienne d'interface avec la méthode des éléments finis. Les objectifs spécifiques sont :

1. Étudier les modèles de transition de phase existants pour en dégager les caractéristiques et les difficultés de mise en œuvre ;
2. Développer un modèle de transition de phase basé sur une méthode eulérienne de capture de l'interface dans le cadre d'une discrétisation à l'aide de la méthode des éléments finis ;
3. Implémenter et vérifier le modèle numérique développé ;

Pour atteindre ces objectifs spécifiques, on utilise la méthodologie suivante :

1. Développer le système d'équations aux dérivées partielles (EDP) qui modélise la physique d'un écoulement à surface libre avec transition de phase basé sur une méthode de capture eulérienne de l'interface entre les phases. On s'inspire des travaux faits par Dufour (1999), Rivard (2012), Ishii et Hibiki (2011), Juric (1996) et Esmaeli et Tryggvason (2004a) ;
2. Adapter le code d'éléments finis développé à Polytechnique par l'équipe du Professeur Dufour au modèle d'écoulement à surface libre avec transition de phase ;
3. Vérifier le modèle numérique développé à l'aide d'un problème pour lequel on connaît la solution exacte et qui reflète la physique observée.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

Les écoulements multiphases et leur thermodynamique sont étudiés depuis plusieurs décennies déjà (Ishii, 1975; Hung, 1979) et les simulations en deux dimensions sont maintenant chose courante (Tryggvason et al., 2011; Ishii et Hibiki, 2011). Parmi les travaux présentés dans la littérature, on retrouve, entre autres, l'étude de l'ébullition à l'intérieur de microcanaux (Yarin et al., 2008; Kandlikar, 2012) ou de l'évaporation d'une bulle dans une cavité (Daru et al., 2006). On note aussi l'intérêt à explorer l'effet des champs électromagnétiques sur les transferts d'énergie et sur les transitions de phase (Siedel et al., 2016; Hanafizadeh et al., 2016; Pandey et al., 2016). Malgré ces avancements significatifs, le phénomène de transition de phase est encore mal compris et les simulations tridimensionnelles en sont encore à leurs débuts (Can et Prosperetti, 2012; Hardt et Wondra, 2008; Tanguy et al., 2007; Esmaeeli et Tryggvason, 2004a,b,c).

Cette situation s'explique par le fait qu'une grande variété d'approches numériques et théoriques existent pour décrire ce phénomène et aussi par le fait que les données expérimentales sur le sujet sont toujours peu nombreuses. Ainsi, une grande partie des recherches portent davantage sur l'étude des modèles numériques que sur l'étude du phénomène physique lui-même (Tryggvason et al., 2005). L'étude que nous proposons s'inscrit donc dans un contexte où on cherche à déterminer quelles sont les méthodes applicables aux problèmes de transition de phase et comment s'appliquent de telles méthodes à ces problèmes. La nature du phénomène de transition de phase fait en sorte qu'il est difficile à étudier expérimentalement. De plus, la complexité des principes physiques en cause (physique de la surface libre et de son énergie, physique de la structure interne de la matière et des forces de cohésion des molécules, thermodynamique des fluides, etc.) rend l'étude du phénomène difficile.

La modélisation numérique d'un écoulement avec transition de phase comporte deux aspects importants : la modélisation de la dynamique de l'écoulement multiphase et le modèle décrivant une transition de phase.

2.1 Écoulements multiphases

Les approches numériques pour la simulation d'un écoulement multiphase se divisent en deux catégories principales :

1. Les méthodes dites eulériennes, où la surface libre est représentée de manière implicite à l'aide d'un marqueur $F(\mathbf{x}, t)$ qui est transporté dans le domaine de calcul à l'aide d'une équation de transport. On gagne ainsi en simplicité et les variations topologiques de l'in-

terface sont prises implicitement en charge par le système d'équations qui décrit la dynamique de l'écoulement. On perd toutefois l'unicité de la représentation de la surface libre et des conditions doivent être spécifiées pour qu'elle soit bien définie (Rivard, 2012). Parmi ces techniques, on retrouve les méthodes « level-set » (Son et Dhir, 2008; Osher et Fedkiw, 2001; Sethian, 1999), les méthodes de type « ghost fluid » (Benson, 1992; Kang et al., 2000) et des méthodes mixtes (Ménard et al., 2007).

2. Les méthodes dites lagrangiennes, où la surface libre qui sépare les phases est suivie de manière explicite à l'aide d'un maillage indépendant de celui utilisé pour discrétiser l'écoulement, qui est spécialement dédié à modéliser sa dynamique. Ces méthodes utilisent alors une variable explicite pour la position de l'interface $x_s = \phi(t)$ qui est mise à jour à chaque pas de temps, permettant ainsi un suivi précis de l'interface. Il est alors plus facile de traiter directement les discontinuités des variables à l'interface. Ces méthodes sont toutefois assez coûteuses et elles nécessitent des ajustements souvent arbitraires pour venir à bout des déformations topologiques de l'interface (Juric et Tryggvason, 1998). Parmi ces techniques, on retrouve les méthodes ALE (Benson, 1989; Anjos et al., 2014) et les méthodes de « front tracking » (Unverdi et Tryggvason, 1992).

Benson (1992) fait une bonne comparaison de ces deux approches à l'aide de la méthode des différences finies et de la méthode des éléments finis.

Dans le cadre de notre étude, on utilise une méthode eulérienne basée sur le concept de pseudo-concentration, à l'aide de la méthode des éléments finis (Thompson, 1986; Dufour, 1999; Voller et al., 2006; Rivard, 2012). La méthode de la pseudo-concentration a été développée et validée dans le contexte de la modélisation d'écoulements multifluides turbulents (Rivard, 2012). Ce travail est à la base de notre étude sur les écoulements avec transition de phase.

Les méthodes lagrangiennes doivent souvent se baser sur des résultats expérimentaux pour bien modéliser l'évolution complexe de surfaces libres, spécialement en ce qui a trait à la séparation de bulles d'une couche de vapeur (Juric, 1996). Elles présentent toutefois l'avantage de représenter explicitement l'interface, ce qui facilite sa localisation pour y calculer des quantités d'intérêt. Toutefois, même avec cet avantage, l'utilisation d'un maillage secondaire qui évolue avec l'interface doit être synchronisé avec le maillage où sont définies les autres variables de l'écoulement. Ces techniques sont difficiles à implémenter et les méthodes eulériennes de type « level-set » sont souvent préférées (Lee et al., 2010; Hysing, 2008; Yap et al., 2006).

Avec une approche eulérienne de capture de l'interface, on élimine complètement le besoin d'un maillage supplémentaire pour la surface libre, et les variations topologiques complexes, comme la coalescence ou le bris de bulles, peuvent être traitées avec plus de généralité (Dufour, 1999). L'inconvénient principal de cette approche est la perte de précision dans la discrétisation de l'interface.

On peut toutefois utiliser des stratégies numériques, comme l'utilisation d'un maillage adaptatif ou une technique de réinitialisation de la pseudo-concentration, pour éviter les déformations purement numériques. Il a été montré toutefois que de telles méthodes doivent être utilisées le moins possible puisqu'elles introduisent des erreurs (Rivard, 2012).

À notre connaissance, la littérature portant sur l'étude des problèmes de transition de phase à l'aide de la méthode des éléments finis et de la pseudo-concentration est peu développée. Les méthodes les plus utilisées sont en général un agencement des méthodes de différences finies ou de volumes finis avec une méthode lagrangienne ou eulérienne. Les résultats obtenus à l'aide de ces méthodes sont prometteurs mais montrent encore certaines lacunes par rapport aux résultats expérimentaux observés (Juric et Tryggvason, 1998; Hardt et Wondra, 2008). Ces lacunes surviennent surtout lors de la comparaison de la forme de la surface libre obtenue numériquement à celle observée expérimentalement, quand une telle comparaison est possible.

2.2 Écoulements multiphases avec transition de phase

Pour modéliser une transition de phase, en plus de la représentation des deux phases, on doit être en mesure d'imposer un flux de masse et un flux d'énergie entre les deux phases. Ces flux sont le moteur du phénomène et ils dominent la dynamique de l'écoulement. Dans les équations aux dérivées partielles (EDP), ils sont représentés par des termes sources qui agissent à l'interface. Le calcul de ces termes est ce qui distingue les modèles numériques utilisés.

On montre plus loin que le calcul du flux de masse à l'interface se réduit au calcul du flux d'énergie au même endroit. On doit donc utiliser une technique pour mesurer l'énergie qui passe d'une phase à l'autre et une technique pour imposer le flux de masse correspondant à l'interface. La technique « normal probe » décrite par Udaykumar et al. (1999) illustre l'idée de base derrière la plupart des méthodes de mesure de flux d'énergie. Il s'agit d'identifier les points où on souhaite mesurer un flux d'énergie et ensuite de procéder à une interpolation de la valeur de la température en échantillonnant celle-ci à des endroits bien choisis. Une autre méthode est décrite par Juric (1996) où une relation implicite est dérivée à partir de la condition de Gibbs-Thomson et s'utilise de manière itérative. Toutefois, Esmaeeli et Tryggvason (2004a) montrent qu'en utilisant une différence finie pour approximer le flux d'énergie, on élimine les itérations nécessaires à la méthode implicite décrite par Juric (1996).

Une fois les flux d'énergie calculés, on doit les imposer sous la forme de termes sources dans les EDP. L'imposition des termes sources correspondants à ces flux d'énergie est un défi numérique de taille (Esmaeeli et Tryggvason, 2004a; Jamet et al., 2001), car ce sont des flux ponctuels qui causent des discontinuités à l'interface et ils mettent à l'épreuve les techniques employées en général.

On doit aussi considérer la température à laquelle une transition de phase se produit dans un fluide. Comme la transition de phase a lieu à l'interface, on doit déterminer la température à cet endroit et on doit l'imposer, car c'est une contrainte imposée au fluide pendant la transition de phase. Juric et Tryggvason (1998) fait un exposé des différentes approximations possibles pour cette température et présente les valeurs correspondantes pour différents fluides. Il est possible de l'imposer implicitement, comme le fait Juric (1996), en utilisant une relation thermodynamique (Gibbs-Thomson), ou comme le font Esmaceli et Tryggvason (2004a) avec une différence finie modifiée qui fait intervenir la température de saturation. Il est aussi possible de l'imposer de manière explicite, sous la forme d'une condition de Dirichlet, comme le font Son et Dhir (2008).

Finalement, la densité et la distribution des sites de nucléation (cf. section 1.1) est un autre aspect d'une étude sur les transitions de phase qui doit être abordé. Puisque la formation des bulles de vapeur n'est possible qu'à partir des sites de nucléation, leur nombre et leur emplacement affecte la dynamique de l'ébullition. Shin et al. (2005) montrent que les données obtenues des simulations numériques sont plus représentatives lorsque la densité et la distribution des sites de nucléation est prise en compte.

CHAPITRE 3 MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS À SURFACE LIBRE AVEC TRANSITION DE PHASE

Dans ce chapitre, on présente les équations qui composent le modèle d'écoulements à surface libre avec transition de phase. L'objectif de cette démarche est de bien comprendre comment la modélisation d'une transition de phase s'inscrit dans la mécanique des fluides. Pour cette raison, on énonce les lois physiques qui sont à la base du phénomène et on développe ensuite les équations qui expriment la dynamique du modèle.

3.1 Représentation d'un écoulement à surface libre

3.1.1 Surface libre

Les travaux présentés dans ce mémoire utilisent la représentation d'un écoulement multifluide introduite par Thompson (1986). Une surface libre est une couche sans épaisseur qui sépare deux fluides. Leur phase peut être solide, liquide ou gazeuse. Plus particulièrement, on s'intéresse aux écoulements où un liquide est en contact avec sa phase vapeur. La nouveauté ici est que pendant une transition de phase, il y a un transfert d'énergie et de matière entre les deux phases du fluide. La dynamique particulière des écoulements avec transition de phase nécessite une reformulation du problème d'écoulement multifluide.

On note Ω le domaine qu'occupent les phases. Comme illustré à la figure 3.1, Ω_v est occupé par la phase vapeur et Ω_ℓ est occupé par la phase liquide. La surface libre entre les fluides, qu'on appelle aussi interface, est notée par S et sépare les deux phases. Sa normale est représentée par \mathbf{n}_s et \mathbf{t}_s est un vecteur du plan tangent.

En l'absence d'une transition de phase, on doit retrouver les caractéristiques habituelles de l'écoulement. On note \mathbf{u}_v la vitesse de la phase vapeur, \mathbf{u}_ℓ est la vitesse de la phase liquide et \mathbf{u}_s est la vitesse de l'interface. En l'absence de transition de phase, on doit récupérer les conditions de continuité de la vitesse normale et tangentielle à l'interface entre les phases :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_v \cdot \mathbf{n}_s &= \mathbf{u}_\ell \cdot \mathbf{n}_s = \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_s && \text{continuité normale de la vitesse;} \\ \mathbf{u}_v \cdot \mathbf{t}_s &= \mathbf{u}_\ell \cdot \mathbf{t}_s = \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{t}_s && \text{continuité tangentielle de la vitesse,} \end{aligned}$$

pour tout \mathbf{t}_s du plan tangent à l'interface. En présence d'une transition de phase, on doit généraliser ces conditions de manière à permettre un échange de matière entre les phases. Cette condition décrit un saut dans la quantité de mouvement à travers l'interface et est donnée par la relation de Rankine-

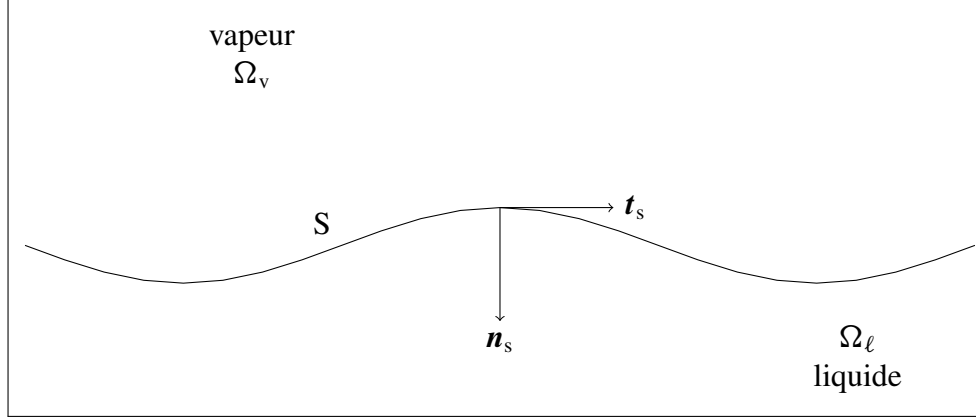


Figure 3.1 Représentation 2D d'une surface libre liquide-vapeur.

Hugoniot qu'on décrit plus tard (Tryggvason et al., 2011). On doit aussi inclure une équation pour l'équilibre des forces agissant sur l'interface,

$$(\boldsymbol{\tau}_v - \boldsymbol{\tau}_\ell) \cdot \mathbf{n}_s = \gamma \kappa \mathbf{n}_s, \quad (3.1)$$

où γ est le coefficient de tension superficielle, κ est la courbure locale de l'interface et τ_v et τ_ℓ représentent respectivement les contraintes dans la phase vapeur et dans la phase liquide à l'interface. Ainsi, l'expression (3.1) représente l'équilibre entre la différence des contraintes des phases à l'interface (donné par le terme de gauche) et la tension superficielle entre les phases (donnée par le terme de droite). Cette équation est en quelque sorte une description de la forme de l'interface donnée par sa courbure κ , qui s'ajuste en fonction des forces de contraintes $\boldsymbol{\tau}$ présentes dans les phases.

3.1.2 La pseudo-concentration

On souhaite obtenir une formulation dite « single-phase flow » (Ishii et Hibiki, 2011) où on utilise un marqueur pour identifier les différentes phases d'un écoulement multiphase. On utilise ici le concept de pseudo-concentration (Thompson, 1986) pour représenter les deux phases. Pour un paramètre physique a quelconque ayant une valeur a_v dans la phase vapeur et une valeur a_ℓ dans la phase liquide, on utilise l'expression

$$a(\mathbf{x}, t) = a_\ell + (a_v - a_\ell)F(\mathbf{x}, t) \quad (3.2)$$

où $F(\mathbf{x}, t)$ est la pseudo-concentration :

$$F(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_v; \\ 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_\ell. \end{cases}$$

On identifie l'interface S entre les phases comme étant les points où on retrouve le saut de F :

$$S = \left\{ \mathbf{x} \mid F(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \right\}.$$

Bien que cette façon de définir une surface libre remplit l'objectif d'identifier les différentes phases de l'écoulement, on doit en exiger plus. La formulation des équations qui régissent la dynamique des fluides nécessite l'hypothèse des milieux continus. Cette hypothèse dit que les quantités liées aux fluides varient de manière continue. Or, comme les quantités physiques sont représentées à l'aide de F via l'équation (3.2), nous devons construire la pseudo-concentration de manière à ce que les propriétés physiques varient de manière continue d'une phase à l'autre. On introduit alors une zone de transition Ω_ϵ qui s'étend à une distance ϵ de chaque côté de l'interface, comme illustré à la figure 3.2. On note que Ω_ϵ est une construction de notre modèle numérique et n'a aucun sens physique. Ainsi, on peut définir F de manière à avoir les propriétés de continuité souhaitées :

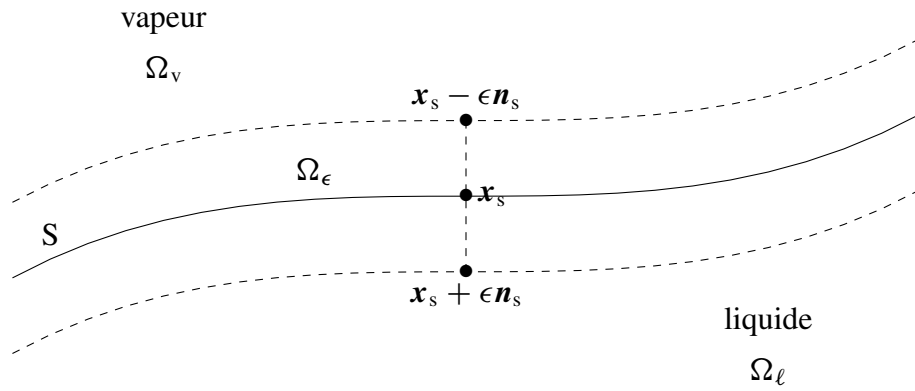


Figure 3.2 Représentation 2D de la zone de transition qui contient l'interface entre les fluides.

$$F(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_v \setminus \Omega_\epsilon; \\ 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_\ell \setminus \Omega_\epsilon; \\ f(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_\epsilon, \end{cases} \quad (3.3)$$

où

$$\Omega_\epsilon = \left\{ \mathbf{x} \mid \min_{\mathbf{x}_s \in S} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_s\| < \epsilon \right\}$$

et où $f(\mathbf{x})$ est une fonction pour laquelle :

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\partial\Omega_\epsilon \cap \Omega_v) = 1; \\ f(\partial\Omega_\epsilon \cap \Omega_\ell) = 0; \\ f(\mathbf{S}) = \frac{1}{2}; \\ \frac{\partial f}{\partial \mathbf{n}_s}(\partial\Omega_\epsilon \cap (\Omega_\ell \cup \Omega_v)) = 0; \\ \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{n}_s^2}(\partial\Omega_\epsilon \cap (\Omega_\ell \cup \Omega_v)) = 0, \end{array} \right. \quad (3.4)$$

où $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{n}_s}$ est défini par l'opérateur $\mathbf{n}_s \cdot \nabla$ et $\frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{n}_s^2}$ est défini par l'opérateur $(\mathbf{n}_s \cdot \nabla)(\mathbf{n}_s \cdot \nabla)$. Cet ensemble de conditions sur la fonction $f(\mathbf{x})$ assure les conditions de régularités nécessaires à l'utilisation de F (cf. section 3.1.3), dont un exemple est illustré à la figure 3.3.

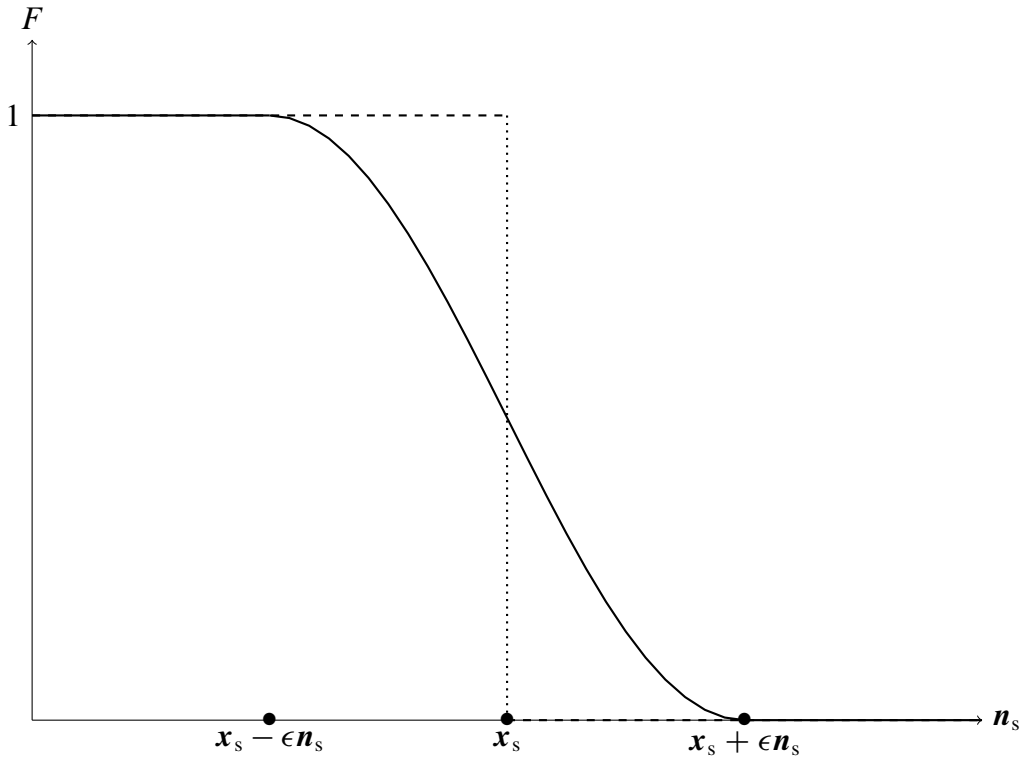


Figure 3.3 Représentation 1D de la pseudo-concentration.

3.1.3 Courbure de l'interface et régularité de la pseudo-concentration

Comme on considère un écoulement où les deux phases sont immiscibles, on doit tenir compte de la tension superficielle subie par la surface qui sépare les phases (cf. équation (3.1)). Cette force est générée par la courbure κ de l'interface aux points \mathbf{x}_s tels que $F(\mathbf{x}_s, t) = \frac{1}{2}$. On voit plus loin que pour obtenir les équations de la dynamique de l'écoulement, on utilise une approximation volumique de cette courbure :

$$\kappa(F) \simeq -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla F}{\|\nabla F\|} \right). \quad (3.5)$$

Cette expression fait intervenir les dérivées de F jusqu'à l'ordre 2. On impose à F d'être suffisamment régulière pour qu'elle soit bien définie.

3.2 Lois de conservation

On débute en considérant une quantité fixe de matière qui occupe un volume initial Ω_0 . Cette quantité de matière peut être composée en partie d'une phase liquide et d'une phase gazeuse et on veut permettre l'échange de matière entre ces phases. La seule restriction est qu'on ne peut pas perdre ou créer de matière. On pourra donc énoncer les lois physiques qui s'appliquent à cette quantité de matière tout en permettant à Ω_0 de se déformer autant que nécessaire pour respecter cette unique contrainte. Ce point de vue bien connu est le point de vue lagrangien. Cette méthode semble être la plus naturelle pour décrire les principes fondamentaux qui régissent notre modèle.

Dans la formulation des écoulements à surface libre incompressibles, on doit habituellement avoir un champ de vitesse à divergence nulle partout dans le domaine ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$). Pour notre étude, on conserve la nature incompressible des fluides, mais on ne peut plus imposer la divergence nulle du champ de vitesse partout dans le domaine à cause de la variation de volume entraînée lors d'une transition de phase.

3.2.1 Conservation de la masse

Pour obtenir le système d'EDP qui décrit notre modèle, on doit d'abord énoncer le principe de conservation de la masse. L'équation ainsi obtenue sera utile au développement de toutes les autres équations. En particulier, c'est ici qu'on développe l'expression qui remplace la condition habituelle d'incompressibilité d'un fluide.

La masse d'une quantité de matière s'écrit comme

$$m(t) = \int_{\Omega_t} \rho(\mathbf{x}, t) dV,$$

où Ω_t est le domaine spatial occupé par la matière au temps t et où $\rho(\mathbf{x}, t)$ est la masse volumique du fluide. En présence d'une transition de phase, cette masse est conservée puisque la matière n'est ni créée, ni détruite. Elle est simplement convertie d'une phase à l'autre. On aura donc

$$\frac{d}{dt}m(t) = \frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \rho(\mathbf{x}, t) dV = 0.$$

On remarque ici que la densité est une fonction du temps et de l'espace. Avec le point de vue lagrangien, on a que $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{a}, t)$ où $\mathbf{a} = \mathbf{x}(\mathbf{a}, t_0)$ est la position initiale d'une particule de matière dans le domaine étudié. On peut donc voir $\mathbf{x}(\mathbf{a}, t)$ comme la trajectoire de la particule de matière qu'occupe le point initial \mathbf{a} . De plus, on ne peut pas commuter les opérateurs d/dt et \int puisque le domaine d'intégration dépend justement du temps t . On aura plutôt

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \rho(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\Omega_t} \left(\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{x}, t) + \rho(\mathbf{x}, t) \nabla \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{x}(\mathbf{a}, t) \right) dV = 0,$$

où on passe la dérivée d/dt à l'intérieur de l'intégrale en utilisant le théorème de convection de Reynolds (Meyer (1971), p. 10), ce qui fait apparaître le second terme dans l'intégrale. Ceci nous donne l'équation

$$\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{x}, t) + \rho(\mathbf{x}, t) \nabla \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{x}(\mathbf{a}, t) = 0. \quad (3.6)$$

La fonction $\mathbf{x}(\mathbf{a}, t)$ donne la position de chaque particule à l'étude dans le système et

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{x}(\mathbf{a}, t)$$

est la vitesse de cette particule. L'équation (3.6) devient donc

$$\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{x}, t) + \rho(\mathbf{x}, t) \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0.$$

En utilisant la définition de la dérivée totale, on trouve

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \left(\frac{\partial \mathbf{x}(\mathbf{a}, t)}{\partial t} \cdot \nabla \right) = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \equiv \frac{D}{Dt}. \quad (3.7)$$

L'opérateur D/Dt est souvent utilisé dans la littérature et il est appelé *dérivée matérielle* ou *dérivée convective*. Il diffère de d/dt dans le sens où on utilise \mathbf{u} en l'interprétant comme la vitesse de l'écoulement. Quand il n'y a pas de distinction entre la dérivée de la position et la vitesse qui caractérise l'écoulement, on a $D/Dt = d/dt$. Dans notre cas, on devra définir une autre vitesse qui décrit l'évolution de la transition de phase indépendamment de la vitesse de l'écoulement. Ceci introduit une différence importante entre ces deux expressions de la dérivée et on devra l'identifier plus tard.

L'équation finale pour la conservation de la masse est donc

$$\frac{D}{Dt}\rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.8)$$

En utilisant l'équation (3.7), on peut écrire l'équation (3.8) sous la forme

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (3.9)$$

3.2.2 Conservation de la quantité de mouvement

À cette étape, on applique la deuxième loi de Newton sur la masse de fluide étudiée. Cette loi dit que la variation de la quantité de mouvement est égale à la somme des forces qui lui sont appliquées,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) dV = \mathbf{f}_{\partial\Omega(t)}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{f}_{\Omega(t)}(\mathbf{x}, t), \quad (3.10)$$

où $\mathbf{f}_{\partial\Omega(t)}(\mathbf{x}, t)$ est l'ensemble des forces appliquées à la frontière du domaine $\Omega(t)$ et où $\mathbf{f}_{\Omega(t)}(\mathbf{x}, t)$ est l'ensemble des forces agissant sur chaque particule de matière dans ce domaine.

Pour décrire $\mathbf{f}_{\partial\Omega(t)}(\mathbf{x}, t)$, on considère les forces de déformation données par le tenseur des contraintes

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u}) - \left(\frac{2\mu}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} + p\right) \boldsymbol{\delta},$$

où μ est la viscosité, $\dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u}) = \frac{\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T}{2}$ est le tenseur du taux de déformation, p est la pression et $\boldsymbol{\delta}$ est le tenseur de Kronecker (δ_{ij} vaut 1 si $i = j$ et 0 sinon). On doit aussi considérer la force capillaire. Elle est donnée par

$$\mathbf{f}_C = \gamma \kappa \mathbf{n}_s$$

où γ est le coefficient de tension superficielle, κ est la courbure de l'interface et \mathbf{n}_s est la normale à l'interface S. Ceci nous donne le terme de force

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{\partial\Omega(t)}(\mathbf{x}, t) &= \int_{\partial\Omega(t)} \boldsymbol{\tau} \mathbf{n}_s dS + \int_{S(t)} \mathbf{f}_C dS \\ &= \int_{\partial\Omega(t)} \left(2\mu \dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u}) - \left(\frac{2\mu}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} + p\right) \boldsymbol{\delta}\right) \mathbf{n}_s dS + \int_{\partial\Omega(t)} \gamma \kappa \mathbf{n}_s dS. \end{aligned}$$

Pour le second terme de force, on se limite à la force gravitationnelle. On aura donc

$$\mathbf{f}_{\Omega(t)}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega(t)} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{g} dV \quad (3.11)$$

où \mathbf{g} représente l'accélération gravitationnelle.

Pour obtenir les EDP finales, on doit exprimer toutes ces intégrales sous la même forme. On choisit donc d'exprimer les intégrales sur $\partial\Omega(t)$ comme des intégrales sur $\Omega(t)$. Pour ce faire, on applique le théorème de la divergence sur l'intégrale des contraintes :

$$\int_{\partial\Omega(t)} \boldsymbol{\tau} \mathbf{n}_s dS = \int_{\Omega(t)} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} dV. \quad (3.12)$$

Pour la force capillaire \mathbf{f}_C , on utilise l'approximation volumique \mathbf{f}_{CV} qui a été introduite par Brackbill et al. (1992),

$$\int_{\partial\Omega(t)} \mathbf{f}_C \mathbf{n}_s dS \simeq \int_{\Omega(t)} \mathbf{f}_{CV} dV, \quad (3.13)$$

où $\mathbf{f}_{CV} = \gamma \kappa(F) \nabla F$ et où $\kappa(F)$ est la courbure moyenne donnée par l'expression (3.5). Cette approximation remplace la force capillaire, qui est une force de surface, par une force volumique que l'on pourra traiter numériquement avec plus d'aisance.

En utilisant les équations (3.9), (3.10), (3.11), (3.12), (3.13) et le théorème de Reynolds (cf. (3.9)), on obtient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho \mathbf{u} dV &= \int_{\Omega(t)} \left(\frac{D}{Dt} (\rho \mathbf{u}) + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) dV \\ &= \int_{\Omega(t)} (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_{CV}) dV \end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} (\rho \mathbf{u}) + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_{CV} \\ &= \nabla \cdot \left(2\mu \dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u}) - \frac{2\mu}{3} \delta \nabla \cdot \mathbf{u} \right) - \nabla p + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_{CV}. \end{aligned}$$

En appliquant la loi de conservation de la masse, on obtient la forme équivalente

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot \left(2\mu \dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u}) - \frac{2\mu}{3} \delta \nabla \cdot \mathbf{u} \right) - \nabla p + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_{CV}. \quad (3.14)$$

C'est l'équation de conservation de la quantité de mouvement qu'on utilisera.

3.2.3 Conservation de l'énergie thermique

L'équation de conservation de l'énergie thermique nécessite un développement plus exhaustif et risquerait d'alourdir inutilement le texte. Pour cette raison, on choisit d'omettre la première partie du développement de cette équation qui établit le bilan d'énergie d'un système et qui l'exprime en fonction de la température. Le lecteur intéressé peut se référer à Bird et al. (2002) pour une lecture

adaptée au contexte de la mécanique des fluides. On prend la formulation générale donnée par Bird et al. (2002) :

$$\rho C \frac{DT}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} - T \frac{\partial p}{\partial T} \nabla \cdot \mathbf{u} - \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} \quad (3.15)$$

où $p = p(\rho, T)$ est la pression, $C = C_v$ est la conductivité thermique à volume constant et $\mathbf{q} = -k \nabla T$ est le flux d'énergie thermique donné par la loi de Fourier. On prendra $\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} = 0$ puisqu'on néglige la dissipation visqueuse.

On veut décrire $\partial p / \partial T$ en fonction de ρ et de T de manière à ce que l'équation (3.15) ne fasse pas intervenir directement la pression p . On y arrive à l'aide de la relation de Clausius-Clapeyron,

$$\frac{\partial p}{\partial T} = \frac{L/T}{1/\rho_v - 1/\rho_\ell}, \quad (3.16)$$

où L est la chaleur latente par unité de masse nécessaire pour la transition de phase et où ρ_v et ρ_ℓ sont respectivement la masse volumique de la phase vapeur et la masse volumique de la phase liquide. On a finalement, des équations (3.15) et (3.16),

$$\rho C \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) - \frac{L}{(1/\rho_v - 1/\rho_\ell)} \nabla \cdot \mathbf{u}$$

qui peut aussi s'écrire sous la forme

$$\rho C \frac{\partial}{\partial t} T + (\rho C \mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla \cdot (k \nabla T) - \frac{L}{(1/\rho_v - 1/\rho_\ell)} \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (3.17)$$

3.3 Équation de transport de l'interface

L'objectif maintenant est de développer l'équation qui décrit l'évolution de la pseudo-concentration $F(\mathbf{x}, t)$. Soit \mathbf{x}_s tel que $F(\mathbf{x}_s, t) = \frac{1}{2}$ qui identifie une isosurface de la pseudo-concentration qui représente l'interface entre les fluides. En notant $\mathbf{x}_s = \mathbf{x}_s(\mathbf{x}_0, t)$, où \mathbf{x}_0 est la position initiale de ce point, on comprend que \mathbf{x}_s est un point qui demeure sur l'interface. Le champ de vitesse qui décrit l'évolution de l'interface $\mathbf{u}_s(\mathbf{x}_s, t)$ est donné par

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{x}_s(\mathbf{x}_0, t) = \mathbf{u}_s(\mathbf{x}_s, t) = \mathbf{u}(\mathbf{x}_s, t) + \mathbf{v}(\mathbf{x}_s, t),$$

où \mathbf{u} (sans indice s) est la vitesse de l'écoulement du fluide et \mathbf{v} est la vitesse qui est due à la transition de phase. Comme $F(\mathbf{x}_s, t) = \frac{1}{2}$ décrit une isosurface, on a alors

$$\frac{d}{dt} F(\mathbf{x}_s, t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \right) = 0. \quad (3.18)$$

Il est important de remarquer qu'on ne doit pas utiliser la dérivée convective D/Dt pour établir cette relation, car elle serait fautive puisqu'elle est décrite en fonction de la vitesse de l'écoulement \mathbf{u} . En développant l'équation (3.18), on trouve

$$\frac{d}{dt}F(\mathbf{x}_s, t) = \frac{\partial}{\partial t}F(\mathbf{x}_s, t) + \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{x}_s \cdot \nabla F(\mathbf{x}_s, t) = 0.$$

L'équation de transport recherchée est donc

$$\frac{\partial}{\partial t}F(\mathbf{x}_s, t) + \mathbf{u}_s(\mathbf{x}_s, t) \cdot \nabla F(\mathbf{x}_s, t) = 0. \quad (3.19)$$

Bien que F soit définie partout dans le domaine Ω , l'équation (3.19) a été développée pour les points \mathbf{x}_s sur la surface S . On aimerait avoir une équation qui décrit l'évolution de $F(\mathbf{x}, t)$ partout dans le domaine Ω , et non seulement à l'interface des phases. L'hypothèse qu'on fait est de supposer que cette équation tient sur tout le domaine Ω ,

$$\frac{\partial}{\partial t}F(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}_s(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla F(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (3.20)$$

où $\mathbf{u}_s(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$. Cette décomposition de \mathbf{u}_s permet de séparer la contribution de la vitesse de transition de phase \mathbf{v} , de la contribution de la vitesse de l'écoulement \mathbf{u} . La vitesse \mathbf{u} décrit l'écoulement des fluides sur tout le domaine et doit satisfaire aux équations (3.9), (3.14) et (3.17). La vitesse \mathbf{v} est purement l'effet d'une transition de phase et est développée plus loin. Lorsqu'aucune transition de phase n'est présente, on a $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ et donc $\mathbf{u}_s = \mathbf{u}$.

3.4 Système d'EDP incompressible avec transition de phase

À l'aide des équations (3.9), (3.14), (3.17) et (3.20), on obtient le système d'EDP :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}) - \frac{2}{3}\mu \delta \nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla p + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_{cv}; \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0; \\ \frac{\partial}{\partial t} F + (\mathbf{u} + \mathbf{v}) \cdot \nabla F = 0; \\ \rho C \frac{\partial}{\partial t} T + (\rho C \mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla \cdot (k \nabla T) - \frac{L}{(1/\rho_v - 1/\rho_\ell)} \nabla \cdot \mathbf{u}. \end{array} \right. \quad (3.21)$$

Les conditions aux limites du système sont données par

$$\begin{cases} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_{Du}, & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_{Du} \text{ et } \forall t \geq 0; \\ \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = t_{Nu}, & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_{Nu} \text{ et } \forall t \geq 0; \\ T(\mathbf{x}, t) = T_{DT}, & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_{DT} \text{ et } \forall t \geq 0; \\ -\nabla T(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = q_{NT}, & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_{NT} \text{ et } \forall t \geq 0; \\ F(\mathbf{x}, t) = F_{DF}, & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_{DF}^- \text{ et } \forall t \geq 0, \end{cases}$$

où \mathbf{n} est la normale extérieure à frontière $\partial\Omega$. Ici, la partie de la frontière du domaine où on impose les conditions de Dirichlet est notée $\partial\Omega_{Du}$ pour la vitesse, $\partial\Omega_{DT}$ pour la température et $\partial\Omega_{DF}^- = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega \mid \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0\}$ pour la pseudo-concentration. On fait de même pour les conditions de Neumann en notant $\partial\Omega_{Nu}$ pour la partie de la frontière du domaine où on impose la condition naturelle en vitesse et $\partial\Omega_{NT}$ pour ce qui est de la condition naturelle en température. Ces ensembles partitionnent la frontière et ne peuvent s'intersecter :

$$\begin{cases} \partial\Omega_{Du} \cup \partial\Omega_{Nu} = \partial\Omega; \\ \partial\Omega_{Du} \cap \partial\Omega_{Nu} = \emptyset; \\ \partial\Omega_{DT} \cup \partial\Omega_{NT} = \partial\Omega; \\ \partial\Omega_{DT} \cap \partial\Omega_{NT} = \emptyset. \end{cases} \quad (3.22)$$

Puisqu'on impose des conditions dans un espace tridimensionnel, l'ensemble des conditions exprimées (3.22) s'applique pour chaque dimension. Les conditions initiales sont données par :

$$\begin{cases} \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0, & \forall \mathbf{x} \in \Omega; \\ T(\mathbf{x}, 0) = T_0, & \forall \mathbf{x} \in \Omega; \\ F(\mathbf{x}, 0) = F_0, & \forall \mathbf{x} \in \Omega. \end{cases}$$

Ce système d'équations décrit bien la dynamique d'un écoulement sans hypothèse supplémentaire autre que celle où une transition de phase se produit. Il reste à imposer l'incompressibilité de chaque phase et à définir \mathbf{v} pour comprendre ce que devient la condition sur $\nabla \cdot \mathbf{u}$ là où on retrouve l'interface entre les fluides. Habituellement, pour un écoulement incompressible sans transition de phase, on impose la condition $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ partout dans le domaine Ω . Mais ici, la transition de phase rend les choses un peu plus compliquées.

On obtient le système d'équations (3.21) pour un fluide incompressible en considérant l'équation de continuité (3.9) et en imposant que ρ_v et ρ_ℓ soient constantes. Cette condition a pour effet d'annuler

toutes les dérivées de ces quantités, l'idée étant que ρ soit constante dans chaque phase. Comme $\rho = \rho_\ell + (\rho_v - \rho_\ell)F$ et des équations (3.7) et (3.20), l'équation de continuité devient

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \frac{D}{Dt} \rho = -\frac{(\rho_v - \rho_\ell)}{\rho} \frac{D}{Dt} F = \frac{(\rho_v - \rho_\ell)}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla F.$$

En remplaçant ce résultat dans le système (3.21), on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}) - \frac{2\mu}{3} \delta \nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla p + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_{CV}; \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{(\rho_v - \rho_\ell)}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla F; \\ \frac{\partial}{\partial t} F + (\mathbf{u} + \mathbf{v}) \cdot \nabla F = 0; \\ \rho C \frac{\partial}{\partial t} T + (\rho C \mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla \cdot (k \nabla T) + \frac{L \rho_v \rho_\ell}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla F. \end{array} \right. \quad (3.23)$$

Ce sont les équations pour un écoulement incompressible où une transition de phase est permise. On retrouve les équations classiques d'un écoulement incompressible sans transition de phase en posant $\mathbf{v} = \mathbf{0}$. La forme exacte de \mathbf{v} doit être décrite. C'est ce que nous faisons à la prochaine section lors de la description du modèle de transition de phase. Terminons en mentionnant que les propriétés physiques telles que la viscosité, la conductivité thermique et la chaleur latente sont considérées comme étant constantes. Cette première approximation permet de simplifier l'étude de ce phénomène. Dans l'optique d'une étude plus représentative de la physique, on pourrait inclure les effets de la variation de la température sur ces propriétés. Par exemple, on pourrait utiliser l'approximation de Boussinesq pour inclure les effets des variations de température sur la masse volumique de chaque phase.

3.5 Modèle de transition de phase

On développe maintenant les expressions de la vitesse \mathbf{v} et le flux d'énergie \dot{q} qui caractérisent une transition de phase. C'est donc ici qu'on énonce la forme particulière de notre modèle de transition de phase. Dans ce qui suit, on approxime la normale à l'interface à l'aide de l'approximation (cf. équation (3.5))

$$\mathbf{n}_s \simeq -\frac{\nabla F}{\|\nabla F\|}.$$

3.5.1 Vitesse de l'interface

On obtient la vitesse de l'interface en considérant le flux de masse \dot{m} entre les fluides lors de la transition de phases. Ce flux de masse correspond à une variation de la quantité de mouvement ($\rho \mathbf{u}$) d'une phase à l'autre, donnée par la relation de Rankine-Hugoniot (voir Tryggvason et al. (2011)) :

$$\rho_v(\mathbf{u}_v - \mathbf{u}_s) \cdot \mathbf{n}_s = \rho_\ell(\mathbf{u}_\ell - \mathbf{u}_s) \cdot \mathbf{n}_s = \dot{m}, \quad (3.24)$$

où \mathbf{u}_ℓ et \mathbf{u}_v sont respectivement la vitesse de l'écoulement dans la phase liquide et dans la phase vapeur, \mathbf{u}_s est la vitesse de l'interface, \mathbf{n}_s est la normale à l'interface et \dot{m} est le flux de masse d'une phase à l'autre.

En manipulant directement cette relation, on peut l'exprimer sous deux autres formes :

$$(\mathbf{u}_v - \mathbf{u}_\ell) \cdot \mathbf{n}_s = \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_\ell} \right) \dot{m}; \quad (3.25)$$

$$\mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_s = \frac{(\mathbf{u}_\ell + \mathbf{u}_v) \cdot \mathbf{n}_s}{2} - \left(\frac{1}{\rho_v} + \frac{1}{\rho_\ell} \right) \frac{\dot{m}}{2}. \quad (3.26)$$

La première expression donne le saut de vitesse de l'écoulement lorsqu'on passe d'une phase à l'autre. La seconde exprime la vitesse de l'interface comme la vitesse moyenne de l'écoulement dans les deux phases, plus le flux moyen de masse d'une phase à l'autre.

Ces trois relations nous donnent plusieurs possibilités pour décrire la vitesse de l'interface entre les fluides. En exprimant cette vitesse comme une somme de deux effets, $\mathbf{u}_s = \mathbf{u} + \mathbf{v}$, le premier étant dû à l'écoulement des fluides et le second à la transition de phase, on obtient ainsi $\mathbf{v} = \mathbf{u}_s - \mathbf{u}$. En utilisant l'équation (3.26), on a une expression explicite pour \mathbf{v} .

De nombreuses expériences nous permettent toutefois d'observer que si la divergence du champ de vitesse est non nulle à l'interface, alors la zone de transition de la pseudo-concentration subit un fort gradient de vitesse. Ceci entraîne un étirement ou une contraction de la zone de transition du marqueur eulérien dans la direction normale à l'interface. Cet effet sur la zone de transition est indésirable car celle-ci est une construction numérique qui sert à différencier les phases et elle ne joue aucun rôle physique. Nous voulons que la zone de transition reste inchangée dans la direction normale à l'interface tout au long de son évolution avec l'écoulement. Il est certain que l'interface et la zone de transition subiront des déformations causées par l'écoulement, mais il est fortement désirable que la largeur de la zone de transition ϵ demeure constante. C'est précisément ce paramètre ϵ qui est responsable de la représentation des phases dans l'écoulement. Une solution à ce problème est de déplacer la divergence non nulle tout juste à l'extérieur de la zone de transition. De cette manière, on pourra utiliser le fait que $\mathbf{u}(\mathbf{x}_s) = \mathbf{u}_\ell$ à l'interface (ou $\mathbf{u}(\mathbf{x}_s) = \mathbf{u}_v$) et la vitesse

de déplacement de la zone de transition à travers celle-ci sera constante, évitant ainsi les déformations indésirables. De plus, cette façon de faire nous permet d'utiliser directement la condition de Rankine-Hugoniot :

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_s = (\mathbf{u}_s - \mathbf{u}(\mathbf{x}_s)) \cdot \mathbf{n}_s = (\mathbf{u}_s - \mathbf{u}_\ell) \cdot \mathbf{n}_s = -\frac{\dot{m}}{\rho_\ell}.$$

On a décidé ici de placer le terme de divergence non nulle dans la phase vapeur, ce qui impose $\mathbf{u}(\mathbf{x}_s) = \mathbf{u}_\ell$ à l'interface. À priori, ce choix est arbitraire, l'unique but étant d'éliminer la déformation de la zone de transition.

Le flux de masse \dot{m} s'obtient en fonction du flux d'énergie à l'aide de la relation $\dot{m} = -\dot{q}/L$ où L est la chaleur latente. Ceci donne l'expression

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_s = \frac{\dot{q}}{\rho_\ell L}, \quad (3.27)$$

qui peut aussi s'écrire sous la forme

$$\mathbf{v} \cdot \nabla F = -\frac{\dot{q}}{\rho_\ell L} \|\nabla F\|. \quad (3.28)$$

3.5.2 Expression du flux d'énergie

Lors d'une transition de phase, de l'énergie est absorbée ou libérée par le fluide. Cet échange d'énergie entre les phases a lieu à l'interface où se produit la transition de phase. Pour passer d'une phase à l'autre, le fluide absorbe ou libère de l'énergie pour permettre à sa structure interne d'être modifiée. Ainsi, par exemple, si on fait bouillir un liquide en le chauffant dans un récipient posé sur une source de chaleur, l'énergie qui est fournie au fluide est absorbée à l'interface et sert à transformer la phase liquide en phase vapeur. C'est donc à l'interface qu'on doit définir un flux d'énergie. Ce flux est une mesure de l'énergie qui traverse l'interface en passant d'une phase à l'autre. Ici, l'énergie est proportionnelle à la température. Donc, pour décrire un flux d'énergie, on utilise la variation de température dans l'espace, qui s'obtient à l'aide du gradient de celle-ci.

Pour définir un flux d'énergie à travers l'interface, on utilise la loi de Fourier qui dit qu'une quantité d'énergie qui traverse une unité de surface par unité de temps est donnée par la relation $\dot{q} = -k(\nabla T \cdot \mathbf{n}_s)$ où k est la diffusivité thermique du fluide considéré et où \mathbf{n}_s est la normale à la surface. On définit maintenant le flux d'énergie \dot{q} en prenant soin d'obtenir une quantité positive pour l'évaporation (énergie absorbée) et une quantité négative pour la condensation (énergie libérée).

Soit $T(\mathbf{x}_s, t)$ la température à l'interface au temps t . Le flux d'énergie de la phase vapeur vers la

phase liquide à travers l'interface S est donné par

$$\dot{q}_v = k_v \left(\frac{T(\mathbf{x}_s - h\mathbf{n}_s, t) - T(\mathbf{x}_s, t)}{h} \right)$$

et le flux d'énergie de la phase liquide vers la phase vapeur est donné par

$$\dot{q}_\ell = k_\ell \left(\frac{T(\mathbf{x}_s, t) - T(\mathbf{x}_s + h\mathbf{n}_s, t)}{h} \right)$$

où \mathbf{n}_s est la normale à l'interface et h est la distance avec laquelle on mesure la température par rapport à l'interface. Le flux net à travers l'interface est donné par $\dot{q} = \dot{q}_v - \dot{q}_\ell$.

La principale caractéristique d'une transition de phase est que la phase qui libère de la masse vers l'autre phase demeure à température constante durant le processus sous conditions normales. On peut prendre en exemple l'eau qui bout à environ 100 °C et la glace qui fond à environ 0 °C à une pression d'environ 101,3 kPa. On doit donc reproduire ce comportement. Pour y arriver, on s'inspire de la démarche de Esmaeeli et Tryggvason (2004a) en remplaçant $T(\mathbf{x}_s, t)$ par $T_{\text{sat}}(\mathbf{x}_s, t)$ dans les expressions pour \dot{q}_v et \dot{q}_ℓ . T_{sat} est la température à laquelle la transition de phases doit se produire. Pour notre étude, on suppose que cette température est constante. Cette simplification est en général une bonne première approximation (voir Juric et Tryggvason (1998)). On obtient donc la relation

$$\dot{q} = \dot{q}_v - \dot{q}_\ell = k_v \left(\frac{T(\mathbf{x}_s - h\mathbf{n}_s, t) - T_{\text{sat}}}{h} \right) + k_\ell \left(\frac{T(\mathbf{x}_s + h\mathbf{n}_s, t) - T_{\text{sat}}}{h} \right). \quad (3.29)$$

On voit que l'énergie supplémentaire (ou déficitaire) dans chaque phase contribue à la transition de phase. En effet, les deux termes du membre de droite de l'équation (3.29) font chacun intervenir la différence de température dans la phase vapeur ou dans la phase liquide.

3.5.3 Système d'EDP final

En remplaçant l'expression (3.28), obtenue pour \mathbf{v} dans le système (3.23), on obtient le système final suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}) - \frac{2}{3}\mu \delta \nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla p + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_{cv}; \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_\ell} \right) \left(\frac{\dot{q}}{L} \right) \|\nabla F\|; \\ \frac{\partial}{\partial t} F + \left(\mathbf{u} + \frac{\dot{q}}{\rho_\ell L} \mathbf{n}_s \right) \cdot \nabla F = 0; \\ \rho C \frac{\partial}{\partial t} T + (\rho C \mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla \cdot (k \nabla T) - \dot{q} \|\nabla F\|. \end{array} \right. \quad (3.30)$$

3.5.4 Formes adimensionnelles

Deux écoulements peuvent partager les mêmes caractéristiques sans nécessairement partager les mêmes paramètres physiques. En d'autres termes, deux fluides différents peuvent générer des écoulements similaires, mais à des vitesses et à des échelles de grandeurs différentes. Par exemple, les tourbillons produits dans l'eau à la sortie d'un drain peuvent partager les mêmes caractéristiques qu'une tornade dans le ciel. C'est le rapport des propriétés physiques d'un fluide, de concert avec la taille du système et les vitesses en jeu, qui définit les caractéristiques d'un écoulement. Ainsi, en choisissant les bons rapports de ces quantités, on peut décrire les écoulements générés par différents fluides à l'aide d'un seul regroupement de paramètres. Ces regroupements de paramètres s'écrivent sans dimension et sont appelés *nombres adimensionnels*. C'est à l'aide de ces nombres adimensionnels qu'on caractérise un écoulement sans avoir à décrire le système de façon précise.

Pour introduire les nombres adimensionnels, on doit décrire toutes les quantités représentant un paramètre physique du système en une partie avec dimension, qui caractérise l'échelle de grandeur ou une propriété du système, et en une partie sans dimension. Les quantités ayant des dimensions sont notées d'un « $\tilde{}$ »¹. L'adimensionnalisation associée à notre modèle est donnée au tableau 3.1.

Tableau 3.1 Adimensionnalisation.

$$\begin{array}{llll}
 \tilde{t} = \frac{l}{u_0} t & \tilde{\mathbf{u}} = u_0 \mathbf{u} & \tilde{\nabla} = \frac{1}{l} \nabla & \tilde{p} = \rho_0 u_0^2 p \\
 \frac{\tilde{D}}{D\tilde{t}} = \frac{u_0}{l} \frac{D}{Dt} & \tilde{\rho} = \rho_0 \rho & \alpha = \frac{\rho \ell}{\rho_v} & \tilde{k} = k_0 k \\
 \tilde{c} = c_0 c & \tilde{\mathbf{g}} = G \mathbf{g} & \tilde{q} = \frac{k_0 \Delta T_0}{l} \dot{q} & \\
 \tilde{T} = \Delta T_0 T + T_0 & \tilde{L} = L_0 L & &
 \end{array}$$

À l'aide de cette adimensionnalisation, on peut réécrire le système (3.21) sous forme adimensionnelle :

1. On note que les quantités précédentes possèdent des dimensions et ne sont pas notées d'un « $\tilde{}$ ». On fait ce choix de manière à alléger la notation. Cette convention sera préservée pour le reste du document sauf sous mention explicite.

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}) - \frac{2}{3}\mu \delta \nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla p + \frac{1}{\text{Fr}^2} \rho \mathbf{g} + \frac{1}{\text{We}} \mathbf{f}_{\text{cv}}; \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = (\alpha - 1) \frac{\text{Ja}}{\text{Pe}} \left(\frac{\dot{q}}{L} \right) \|\nabla F\|; \\ \frac{\partial}{\partial t} F + \left(\mathbf{u} + \frac{\text{Ja} \dot{q}}{\text{Pe} L} \mathbf{n}_s \right) \cdot \nabla F = 0; \\ \rho C \frac{\partial}{\partial t} T + (\rho C \mathbf{u} \cdot \nabla) T = \frac{1}{\text{Pe}} \nabla \cdot (k \nabla T) - \frac{1}{\text{Pe}} \dot{q} \|\nabla F\|, \end{array} \right. \quad (3.31)$$

où $\text{Re} = \frac{\rho_0 u_0 \ell}{\mu_0}$ est le *nombre de Reynolds*, $\text{Fr}^2 = \frac{u_0^2}{G \ell}$ est le *nombre de Froude* au carré, $\text{We} = \frac{\rho_0 u_0^2 \ell}{\gamma_0}$ est le *nombre de Weber*, $\text{Ja} = \frac{c_0 \Delta T_0}{L_0}$ est le *nombre de Jacobi* et où $\text{Pe} = \frac{\rho_0 c_0 u_0 \ell}{k_0}$ est le *nombre de Péclet*. Ces cinq nombres adimensionnels servent à décrire les caractéristiques d'un écoulement avec transition de phase. En précisant des valeurs pour chacun d'eux, on peut générer des écoulements avec des caractéristiques différentes. Par exemple, un problème d'écoulement turbulent est parfois caractérisé par un grand nombre de Reynolds alors qu'un écoulement laminaire est caractérisé par un faible nombre de Reynolds. De la même manière, un écoulement avec une forte diffusion de chaleur est caractérisé par un faible nombre de Péclet alors qu'un écoulement dominé par la convection thermique est caractérisé par un grand nombre de Péclet. Finalement, pour un écoulement avec transition de phase, on s'intéresse particulièrement au rapport du nombre de Jacobi et du nombre de Péclet. Plus ce rapport est grand, plus la transition de phase influence le comportement de l'écoulement.

3.6 Méthode de calcul du flux d'énergie

On décrit maintenant la méthode utilisée pour le calcul du flux d'énergie \dot{q} . On doit calculer les flux d'énergie qui traversent l'interface en provenance de la phase vapeur \dot{q}_v et de la phase liquide \dot{q}_ℓ .

Le principal défi pour la mise en œuvre de notre modèle est la représentation eulérienne de l'interface. Contrairement aux méthodes lagrangiennes employées par Esmaeeli et Tryggvason (2004a) ou Juric et Tryggvason (1998), on ne connaît pas l'emplacement exact de l'interface avec une représentation eulérienne. On a plutôt une zone de transition qui est libre d'évoluer selon l'équation de transport (3.20) qui modélise sa dynamique.

L'expression (3.29) obtenue pour le flux d'énergie indique qu'on doit sonder la température de part et d'autre de la zone de transition en chaque point de l'interface. On choisit de représenter ce flux d'énergie comme étant constant par élément, puisqu'il est naturel d'identifier les éléments qui sont

traversés par l'interface. En effet, on peut partitionner le domaine en trois groupes d'éléments : les éléments qui ont des nœuds géométriques uniquement dans l'une ou l'autre des phases ($F < \frac{1}{2}$ ou $F > \frac{1}{2}$ à travers l'élément) et les éléments qui chevauchent l'interface ($F < \frac{1}{2}$ et $F > \frac{1}{2}$ à travers l'élément). Ainsi, les éléments qui recouvrent l'interface forment une couche où on peut définir un flux d'énergie (voir figure 3.4). Ce flux d'énergie doit être défini à travers toute la zone

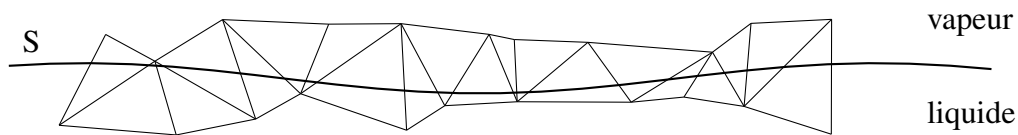


Figure 3.4 Représentation 2D de la couche d'éléments qui recouvre l'interface où on définit un flux constant par élément.

de transition et doit être constant dans la direction normale à l'interface. On doit donc transmettre le flux calculé sur les éléments recouvrant l'interface aux autres éléments dans la direction normale à l'interface. Dans la limite où la taille d'un élément devient petite, on représente l'interface avec plus d'éléments et donc avec plus de précision.

3.6.1 Évaluation du flux d'énergie à l'interface entre les fluides

Pour chaque élément recouvrant l'interface, on s'inspire de la méthode décrite par Esmaeeli et Tryggvason (2004a) pour évaluer le flux d'énergie à travers l'interface. Cette méthode est décrite plus en détails par Udaykumar et al. (1999). Il s'agit de sonder la température à une distance h , de part et d'autre de l'interface. La direction sondée est celle de la normale à l'interface. Donc, si \mathbf{x}_s est un point de l'interface, la température à l'interface est $T(\mathbf{x}_s)$ et la température sondée de part et d'autre est donnée par $T(\mathbf{x}_s \pm h\mathbf{n}_s)$. On choisit h comme étant ϵ , la demi-largeur de la zone de transition, tel qu'illustré à la figure 3.5.

Pour obtenir la température aux points $\mathbf{x}_s \pm \epsilon\mathbf{n}_s$, on détermine quels éléments contiennent ces points et on calcule la température moyenne sur ces éléments. Une fois cette température déterminée, on définit le flux d'énergie à l'aide de la relation (3.29). À cette étape, un flux d'énergie est défini sur chaque élément de la couche d'éléments qui recouvre l'interface.

La normale à l'interface est déterminée à l'aide de l'approximation $\mathbf{n}_s \simeq -\nabla F / \|\nabla F\|$. Comme on utilise des flux d'énergie constants par élément, on utilise la valeur moyenne de \mathbf{n}_s pour avoir une valeur qui est aussi constante par élément. Pour faire cette moyenne, on se sert de la valeur de ∇F en chaque nœud de calcul de l'élément.

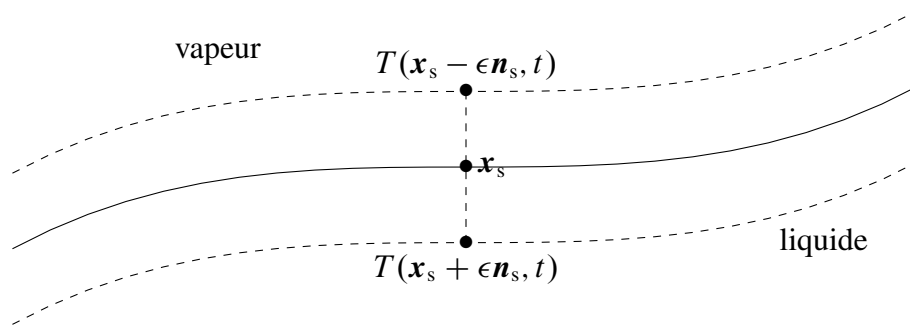


Figure 3.5 Pour évaluer le flux d'énergie $-k \nabla T(\mathbf{x}_s, t)$ à l'interface, on sonde la température de part et d'autre de l'interface pour obtenir $T(\mathbf{x}_s \pm \epsilon \mathbf{n}_s, t)$.

3.6.2 Évaluation de la divergence non nulle du champ de vitesse

Comme on l'a remarqué plus tôt, un terme de divergence non nulle dans la zone de transition crée un fort gradient de vitesse à cet endroit. Ceci a pour effet de déformer la zone de transition d'une manière indésirable. Pour contourner ce problème, on choisit de placer le terme de divergence non nul à l'extérieur de la zone de transition. La condition de Rankine-Hugoniot (3.24) est parfaitement adaptée à cette idée et permet même d'obtenir une expression plus simple pour la vitesse de l'interface (voir l'équation (3.27)), car elle s'exprime en fonction des vitesses de la phase vapeur et de la phase liquide.

Ainsi, on doit reconstruire la couche d'éléments qui recouvre l'interface à l'extérieur de la zone de transition à une distance d qu'on fixe entre 2ϵ et 3ϵ , où ϵ est la demi-largeur de la zone de transition (voir figure 3.6). Pour y arriver, on identifie dans quelle phase on reconstruit la couche d'éléments où le flux d'énergie est préalablement défini. Ensuite, on trouve les éléments de cette phase qui sont à la distance d voulue dans la direction normale à l'interface et on leur attribue la valeur de la divergence prescrite.

3.6.3 Calcul du flux d'énergie à travers la zone de transition

Une fois que le flux d'énergie est défini pour la couche d'éléments qui recouvre l'interface entre les fluides, on doit étendre ce flux d'énergie aux autres éléments dans la zone de transition selon la direction normale à l'interface. À partir des éléments de la couche d'éléments qui recouvre l'interface, on communique les flux calculés dans la direction normale de part et d'autre de l'interface jusqu'aux éléments qui sont à une distance ϵ de l'interface (voir la figure 3.7). On observe que cette façon de faire introduit un saut appréciable du flux d'énergie aux limites de la zone de transition. Pour avoir une variation moins abrupte, on lisse les flux aux extrémités de la zone de transition

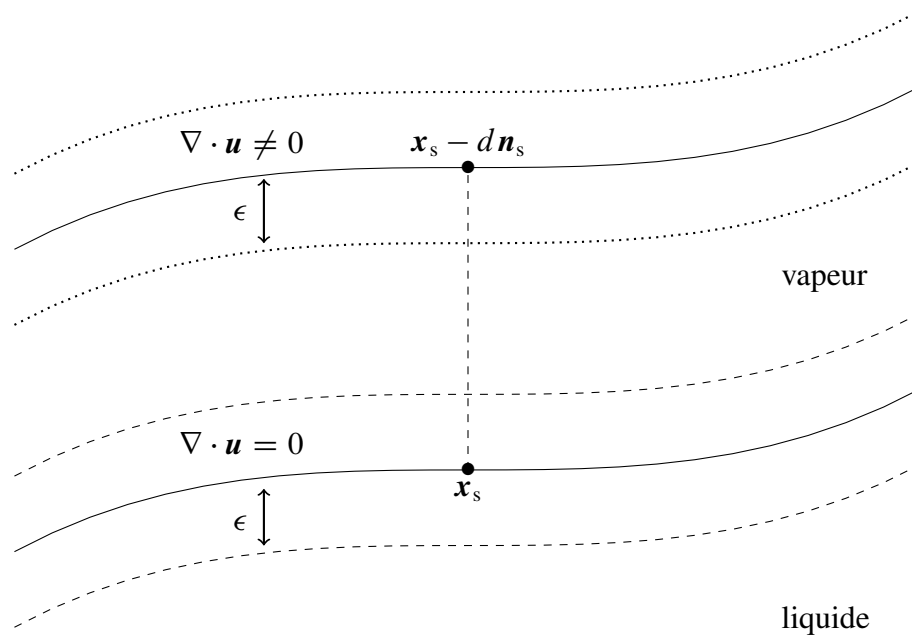


Figure 3.6 Reconstruction de l'interface à l'extérieur de la zone de transition.

dans la direction normale à l'interface (voir la figure 3.8). On utilise une fonction linéaire qui agit sur quelques éléments de chaque côté de la zone de transition. On procède de la même façon pour le terme de divergence non nulle du champ de vitesse, mais à partir de la couche d'éléments reconstruite à l'extérieur de la zone de transition (voir la figure 3.7).

3.7 Conclusion

Dans ce chapitre, on a décrit un modèle pour étudier la dynamique d'un écoulement immiscible et incompressible avec transition de phase. On a d'abord introduit la pseudo-concentration, qui permet de représenter les différents fluides d'un écoulement multifluide (cf. équations (3.2), (3.3) et (3.4)) dans un cadre eulérien. Ensuite, on a développé le système d'équations (3.23) qui décrit l'évolution de l'écoulement. Ce développement forme la base de l'étude de tout écoulement multifluide en tenant compte de la présence d'une transition de phase. On observe dans les équations du système (3.23) que la présence d'une transition de phase introduit des termes qui sont tous proportionnels à la vitesse de déformation de l'interface \mathbf{v} , qui n'apparaît que pour décrire les effets d'une transition de phase (cf. section 3.3). En prenant $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ dans le système (3.23), on récupère le système d'équations d'un écoulement immiscible et incompressible sans transition de phase. On rappelle que l'objectif de ce développement est de comprendre dans quelle mesure les équations de la mécanique des fluides sont modifiées par la présence d'une transition de phase. On a constaté

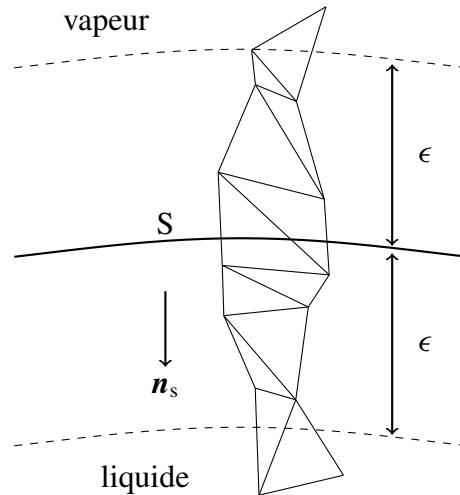


Figure 3.7 Représentation 2D des éléments qui recouvrent la zone de transition entre les fluides. À partir d'un élément qui recouvre l'interface où on a défini un flux d'énergie, on étend cette valeur à tous les autres éléments de la zone de transition dans la direction normale à l'interface.

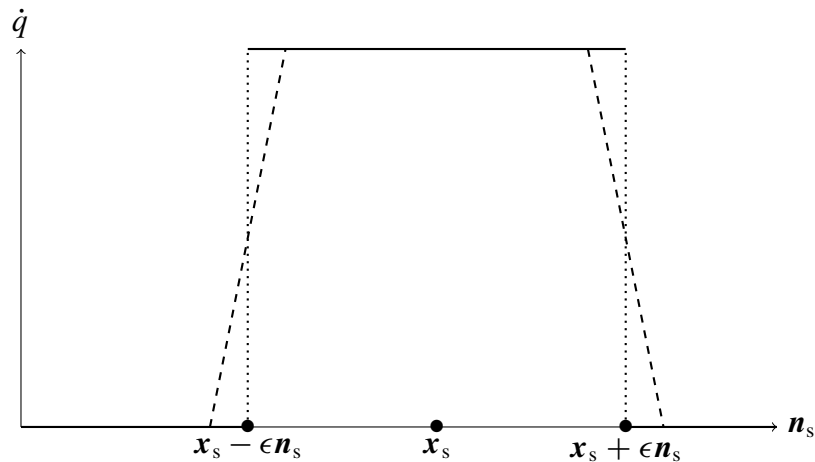


Figure 3.8 Représentation 1D du lissage du terme de flux d'énergie \dot{q} défini à l'interface. On voit une coupe de la zone de transition dans la direction normale à l'interface. La courbe lissée est représentée en trait discontinu. Le saut est représenté en pointillé.

que bien que les lois de conservation ne soient pas modifiées, on doit introduire des termes propres au phénomène de transition de phase. L'équation de transport de la pseudo-concentration et l'hypothèse d'incompressibilité donnent la forme de ces termes en permettant d'exprimer $\nabla \cdot \mathbf{u}$ en fonction de la vitesse \mathbf{v} .

L'étude se poursuit avec la présentation du modèle de transition de phase qui décrit la vitesse \mathbf{v} en

fonction du flux d'énergie \dot{q} produit lors d'une transition de phase (cf. équations (3.27) et (3.28)). On décrit par la suite l'expression du flux d'énergie (3.29) qu'on utilise dans le modèle ce qui nous donne le système d'équations (3.30) final. C'est à cette étape qu'on procède à l'adimensionnalisation (équations (3.31)). Finalement, on décrit la méthode de calcul du flux d'énergie à l'interface et l'évaluation du terme de divergence non nulle à l'extérieur de la zone de transition. Cette dernière étape complète la modélisation d'un écoulement immiscible et incompressible avec transition de phase.

CHAPITRE 4 DISCRÉTISATION DU PROBLÈME

On décrit maintenant la discrétisation des équations du système (3.31). On procède à une discrétisation en espace à l'aide de la méthode des éléments finis et à une discrétisation en temps à l'aide d'une formule aux différences implicite. On présente d'abord les espaces fonctionnels nécessaires à la formulation variationnelle des équations. Ensuite, on présente la discrétisation des formes obtenues. Cette présentation se veut brève et sert à illustrer le formalisme de la méthode employée.

4.1 Espaces fonctionnels

On expose les espaces fonctionnels nécessaires à la discrétisation des équations (3.31). Prenons un domaine Ω de \mathbb{R}^3 , $\partial\Omega$ est sa frontière et $\Lambda \subseteq \partial\Omega$. L'espace des fonctions de carré intégrable est donné par

$$L^2(\Omega) = \left\{ u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_{\Omega} u^2 d\Omega < \infty \right\}$$

et est muni du produit scalaire

$$(u, v)_{0,\Omega} = \int_{\Omega} u v d\Omega.$$

Pour les fonctions de $\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ et de $\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$, on a

$$L^2(\Omega)^n = \left\{ \mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n \mid \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} d\Omega < \infty \right\}$$

et

$$L^2(\Omega)^{n \times n} = \left\{ \boldsymbol{\tau} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n} \mid \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\tau} d\Omega < \infty \right\},$$

avec les produits scalaires

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v})_{0,\Omega} = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} d\Omega$$

pour ce qui est de $L^2(\Omega)^n$ et

$$(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\gamma})_{0,\Omega} = \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\gamma} d\Omega.$$

pour $L^2(\Omega)^{n \times n}$. On doit aussi introduire les espaces de Sobolev qui imposent des restrictions sur les dérivées des fonctions. On a d'abord l'espace

$$H^1(\Omega) = \left\{ u \in L^2(\Omega) \mid \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, 2, 3, \dots, n \right\},$$

pour lequel on a le produit scalaire

$$(u, v)_{1, \Omega} = (u, v)_{0, \Omega} + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial v}{\partial x_i} \right)_{0, \Omega}.$$

Afin d'imposer les conditions aux limites à la frontière du domaine, il est d'usage de définir les espaces de Sobolev où les fonctions sont nulles sur une partie de la frontière. Ainsi on définit :

$$\begin{cases} H_{Du}^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega) \mid u(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ sur } \partial\Omega_{Du}\}; \\ H_{DT}^1(\Omega) = \{T \in H^1(\Omega) \mid T(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ sur } \partial\Omega_{DT}\}, \end{cases}$$

et aussi :

$$\begin{cases} H_{Du}^{1/2}(\Omega) = \{u|_{\partial\Omega_{Du}} \mid u \in H^1(\Omega)\}; \\ H_{DT}^{1/2}(\Omega) = \{T|_{\partial\Omega_{DT}} \mid T \in H^1(\Omega)\}. \end{cases}$$

On obtient ces espaces de Sobolev de $\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ et de $\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ de la même façon en utilisant les espaces $L^2(\Omega)^n$ et $L^2(\Omega)^{n \times n}$.

Ces espaces sont suffisants pour la discrétisation des équations du système (3.31), mise à part l'équation de transport (3.20) qui nécessite une approche différente à cause de sa nature hyperbolique. Pour cette raison, on introduit l'espace

$$L_u^2(\Lambda) = \left\{ \phi : \Lambda \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_{\Lambda} |\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{\Lambda}| \phi^2 d\Omega < \infty \right\}$$

pour lequel on a la relation de dualité

$$\langle \phi, \psi \rangle_{L^2(\Lambda)_u} = \int_{\Lambda} |\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{\Lambda}| \phi \psi d\Omega.$$

On utilise aussi les espaces introduits par Raviart (1981),

$$\begin{cases} \Phi(\Omega) = \left\{ \phi \in L^2(\Omega) \mid \mathbf{u} \cdot \nabla \phi \in L^2(\Omega) \text{ et } \phi(\partial\Omega_{DF}^-) \in L_u^2(\partial\Omega_{DF}^-) \right\}; \\ \Phi_{\partial\Omega_{DF}^-}(\Omega) = \left\{ \phi \in \Phi(\Omega) \mid \phi = 0 \text{ sur } \partial\Omega_{DF}^- \right\}, \end{cases}$$

où $\partial\Omega_{DF}^- = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega \mid \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0\}$ et où \mathbf{n} est la normale extérieure à la frontière $\partial\Omega$.

4.2 Formes faibles

On obtient la forme faible de chaque équation du système (3.31) en la multipliant par une fonction test choisie dans l'espace fonctionnel approprié et en l'intégrant sur le domaine. Cette opération permet de projeter l'action d'une équation différentielle sur l'ensemble des fonctions qui forme l'espace fonctionnel choisi.

On choisit les fonctions tests pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans l'espace $H_{Du}^1(\Omega)^3$. En multipliant et en intégrant, on obtient

$$\begin{aligned} \left(\rho \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}, \mathbf{v} \right)_{0,\Omega} + \left((\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}, \mathbf{v} \right)_{0,\Omega} - \left(\frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}) - \frac{2\mu}{3} \delta \nabla \cdot \mathbf{u}), \mathbf{v} \right)_{0,\Omega} \\ + (\nabla p, \mathbf{v})_{0,\Omega} = \left(\frac{1}{\text{Fr}^2} \rho \mathbf{g}, \mathbf{v} \right)_{0,\Omega} + \left(\frac{1}{\text{We}} \mathbf{f}_{\text{CV}}, \mathbf{v} \right)_{0,\Omega}, \quad \forall \mathbf{v} \in H_{Du}^1(\Omega)^3. \end{aligned}$$

En appliquant le théorème de la divergence, on obtient

$$\begin{aligned} \left(\rho \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}, \mathbf{v} \right)_{0,\Omega} + \left((\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}, \mathbf{v} \right)_{0,\Omega} + \left(\frac{1}{\text{Re}} (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}) - \frac{2\mu}{3} \delta \nabla \cdot \mathbf{u}), \nabla \cdot \mathbf{v} \right)_{0,\Omega} \\ - (p, \nabla \cdot \mathbf{v})_{0,\Omega} = \left(\frac{1}{\text{Fr}^2} \rho \mathbf{g}, \mathbf{v} \right)_{0,\Omega} + \left(\frac{1}{\text{We}} \mathbf{f}_{\text{CV}}, \mathbf{v} \right)_{0,\Omega} \\ + \langle \mathbf{t}_{Nu}, \mathbf{v} \rangle_{H^{-1/2}, H^{1/2}}, \quad \forall \mathbf{v} \in H_{Du}^1(\Omega)^3, \quad (4.1) \end{aligned}$$

où $H^{-1/2}(\Omega)^3$ est le dual de $H^{1/2}(\Omega)^3$. Pour l'équation de conservation de la masse, on choisit les fonctions tests dans l'espace $L^2(\Omega)$. En multipliant et en intégrant, on obtient

$$(\nabla \cdot \mathbf{u}, \psi)_{0,\Omega} = \left((\alpha - 1) \frac{\text{Ja}}{\text{Pe}} \left(\frac{\dot{q}}{L} \right) \|\nabla F\|, \psi \right)_{0,\Omega}, \quad \forall \psi \in L^2(\Omega). \quad (4.2)$$

Pour l'équation de transport de la pseudo-concentration, on a

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} F, \phi \right)_{0,\Omega} + \left(\left(\mathbf{u} + \frac{\text{Ja}}{\text{Pe}} \frac{\dot{q}}{L} \mathbf{n}_s \right) \cdot \nabla F, \phi \right)_{0,\Omega} = 0, \quad \forall \phi \in \Phi_{\partial\Omega_{DF}^-}(\Omega). \quad (4.3)$$

Pour l'équation de conservation de l'énergie, on a

$$\begin{aligned} \left(\rho C \frac{\partial}{\partial t} T, \theta \right)_{0,\Omega} + \left((\rho C \mathbf{u} \cdot \nabla) T, \theta \right)_{0,\Omega} = \left(\frac{1}{\text{Pe}} \nabla \cdot (k \nabla T), \theta \right)_{0,\Omega} \\ - \left(\frac{1}{\text{Pe}} \dot{q} \|\nabla F\|, \theta \right)_{0,\Omega}, \quad \forall \theta \in H_{DT}^1(\Omega). \end{aligned}$$

En appliquant le théorème de la divergence, on obtient

$$\begin{aligned} \left(\rho C \frac{\partial}{\partial t} T, \theta \right)_{0,\Omega} + \left((\rho C \mathbf{u} \cdot \nabla) T, \theta \right)_{0,\Omega} + \left(\frac{1}{\text{Pe}} k \nabla T, \nabla \theta \right)_{0,\Omega} \\ = - \left(\frac{1}{\text{Pe}} \dot{q} \|\nabla F\|, \theta \right)_{0,\Omega} + \langle q_{NT}, \theta \rangle_{H^{-1/2}, H^{1/2}}, \quad \forall \theta \in H_{DT}^1(\Omega). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Pour résoudre le problème constitué des équations (4.1), (4.2), (4.3) et (4.4), on doit trouver $(\mathbf{u}, p, F, T) \in H^1(\Omega)^3 \times L^2(\Omega) \times \Phi(\Omega) \times H^1(\Omega)$.

4.3 Discrétisation

La discrétisation du problème s'effectue en trois étapes à l'aide de la *méthode de Galerkin*. Premièrement, on discrétise le domaine spatial tridimensionnel Ω en le partitionnant de tétraèdres et on note le domaine discret Ω_h où h représente la taille des tétraèdres du maillage ainsi créé. On définit h comme étant la taille du plus grand tétraèdre du maillage avec $h = \sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2}$ où h_x, h_y et h_z sont les dimensions de la plus petite boîte contenant le tétraèdre. Les sommets de ces tétraèdres sont les nœuds géométriques du maillage. On appelle éléments finis ces tétraèdres à l'aide desquels on définit une approximation discrète des espaces fonctionnels nécessaires à la formulation du problème à l'aide de leurs nœuds de calculs (qui ne correspondent pas nécessairement aux nœuds géométriques).

Ceci nous mène à la deuxième étape, qui est la discrétisation des espaces fonctionnels associés aux formes faibles (4.1), (4.2), (4.3) et (4.4). On note $V_h \subset H^1(\Omega)^3$, $Q_h \subset L^2(\Omega)$, $\Phi_h \subset \Phi(\Omega)$ et $\Theta_h \subset H^1(\Omega)$, les espaces fonctionnels discrets qui servent à discrétiser la vitesse, la pression, la pseudo-concentration et la température. Les formes discrètes de ces variables sur chaque tétraèdre du maillage sont données par :

$$\begin{cases} u_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_u} u_i(t) \phi_i^u(\mathbf{x}); & p_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_p} p_i(t) \phi_i^p(\mathbf{x}); \\ v_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_v} v_i(t) \phi_i^v(\mathbf{x}); & F_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_F} F_i(t) \phi_i^F(\mathbf{x}); \\ w_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_w} w_i(t) \phi_i^w(\mathbf{x}); & T_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_T} T_i(t) \phi_i^T(\mathbf{x}), \end{cases}$$

où $\mathbf{u}_h = (u_h, v_h, w_h)$ est l'approximation discrète de \mathbf{u} et où p_h, F_h et T_h sont les approximations

discrètes de p , F et T . Sur chaque tétraèdre du maillage, les fonctions $\phi_i^\chi(\mathbf{x})$ ont la propriété :

$$\phi_i^\chi(\mathbf{x}_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j; \\ 0 & \text{si } i \neq j, \end{cases}$$

où $\chi \in \{u, v, w, p, F, T\}$ et où les points \mathbf{x}_j sont les nœuds de calcul du tétraèdre. Pour toutes ces variables, à l'exception de la pression, on utilise l'élément linéaire P1 dont les nœuds de calcul correspondent aux nœuds géométriques. Pour la pression, on utilise l'élément constant P0 dont l'unique nœud de calcul est placé au barycentre du tétraèdre. Ce choix satisfait la condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi (Brezzi, 1974) qui assure l'existence d'une solution unique.

On complète la méthode de Galerkin en choisissant les fonctions d'interpolation pour chaque variable dans les mêmes espaces discrets que les fonctions tests utilisées pour les formes faibles :

$$\begin{cases} \phi_i^u \in V_h, \text{ pour } i = 1, 2, \dots, N_u; & \phi_i^p \in Q_h, \text{ pour } i = 1, 2, \dots, N_p; \\ \phi_i^v \in V_h, \text{ pour } i = 1, 2, \dots, N_v; & \phi_i^F \in \Phi_h, \text{ pour } i = 1, 2, \dots, N_F; \\ \phi_i^w \in V_h, \text{ pour } i = 1, 2, \dots, N_w; & \phi_i^T \in \Theta_h, \text{ pour } i = 1, 2, \dots, N_T. \end{cases}$$

La troisième étape est la discrétisation en temps. On choisit une formule aux différences implicite pour les dérivées en temps pour chacune des variables :

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}_h(\mathbf{x}, t_k)}{\partial t} = \frac{\alpha \mathbf{u}_h(\mathbf{x}, t_k) - (\alpha + \beta) \mathbf{u}_h(\mathbf{x}, t_{k-1}) + \beta \mathbf{u}_h(\mathbf{x}, t_{k-2})}{\Delta t}; \\ \frac{\partial F_h(\mathbf{x}, t_k)}{\partial t} = \frac{\alpha F_h(\mathbf{x}, t_k) - (\alpha + \beta) F_h(\mathbf{x}, t_{k-1}) + \beta F_h(\mathbf{x}, t_{k-2})}{\Delta t}; \\ \frac{\partial T_h(\mathbf{x}, t_k)}{\partial t} = \frac{\alpha T_h(\mathbf{x}, t_k) - (\alpha + \beta) T_h(\mathbf{x}, t_{k-1}) + \beta T_h(\mathbf{x}, t_{k-2})}{\Delta t}, \end{cases} \quad (4.5)$$

où Δt est le pas de temps avec $t_k = t_0 + k\Delta t$ et $k \in \mathbb{N}$. En prenant $(\alpha, \beta) = (1, 0)$ et $(\alpha, \beta) = (\frac{3}{2}, \frac{1}{2})$, on retrouve respectivement le schéma d'Euler implicite et le schéma de Gear.

En appliquant ces discrétisations aux formes faibles (4.1), (4.2), (4.3) et (4.4), on obtient le système d'équations matricielles non linéaire

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_u + \mathbf{C}_u(\vec{\mathbf{U}}) + \mathbf{A}_u & 0 & \mathbf{B}^T \\ 0 & \mathbf{M}_F + \mathbf{C}_F(\vec{\mathbf{U}}) & 0 \\ \mathbf{B} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M}_T + \mathbf{C}_T(\vec{\mathbf{U}}) + \mathbf{A}_T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{\mathbf{U}} \\ \vec{\mathbf{F}} \\ \vec{\mathbf{P}} \\ \vec{\mathbf{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{\mathbf{G}} \\ \vec{\mathbf{0}} \\ \vec{\mathbf{H}} \\ \vec{\mathbf{Q}} \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

où \mathbf{M}_u , \mathbf{M}_F et \mathbf{M}_T sont les matrices masses en vitesse, en pseudo-concentration et en température. Ces matrices contiennent la discrétisation en temps et sont définies à l'aide des équations (4.5). $\mathbf{C}_u(\vec{U})$, $\mathbf{C}_T(\vec{U})$ et $\mathbf{C}_F(\vec{U})$ sont les matrices de convection, de convection thermique et de transport de la pseudo-concentration. \mathbf{A}_u et \mathbf{A}_T sont les matrices de diffusion visqueuse et de diffusion thermique et \mathbf{B} est la matrice de divergence. Les degrés de liberté inconnus en vitesse, en pseudo-concentration, en pression et en température sont contenus dans les vecteurs \vec{U} , \vec{F} , \vec{P} et \vec{T} . Les vecteurs \vec{G} , \vec{H} et \vec{Q} contiennent les valeurs connues données par le membre de droite des équations (4.1), (4.2), (4.3) et (4.4). Pour résoudre le système (4.6), on doit utiliser une méthode applicable aux équations algébriques non linéaires, comme une méthode de point fixe ou la méthode de Newton.

4.4 Stabilisation

Les équations hyperboliques, telle que l'équation de transport (3.20), ne peuvent pas être discrétisées à l'aide de la méthode de Galerkin sans que des oscillations non physiques soient présentes dans la solution. Une autre méthode doit être utilisée pour leur discrétisation. Pour cette raison, on utilisera la méthode de stabilisation « streamline upwind/Petrov-Galerkin » (SUPG) introduite par Brooks et Hughes (1982). Pour appliquer cette méthode, on utilise des fonctions tests modifiées pour la pseudo-concentration :

$$\hat{\phi}_i^F = \phi_i^F + \tau \mathbf{u}_h \cdot \nabla \phi_i^F$$

où τ est un paramètre de stabilisation qui doit être calculé sur chaque élément (voir Fries et Matthies (2004)).

CHAPITRE 5 PROBLÈME D'ÉBULLITION AVEC SOLUTION EXACTE

On propose maintenant un problème simple pour lequel on connaît la solution exacte, en une dimension, et dont on tente d'étendre les caractéristiques en trois dimensions. L'idée ici est de reproduire le phénomène d'ébullition. Afin de vérifier le module développé, on doit être en mesure de comparer les résultats avec une solution exacte. Puisqu'en trois dimensions, la solution exacte au problème d'ébullition est impossible à obtenir, on définit le problème en une dimension, où on néglige la gravité (Esmaceli et Tryggvason, 2004a), et on effectue la simulation en trois dimensions. Pour simplifier le modèle, les constantes physiques des deux phases sont toutes posées égales à 1, à l'exception de la masse volumique de la phase vapeur.

5.1 Principes théoriques et caractéristiques de la solution

Lorsqu'un liquide bout dans un réservoir chauffé, des bulles de vapeur apparaissent sur la surface chauffée (cf. section 1.1), et une couche de vapeur peut se former entre la surface chauffée et le liquide. En une dimension, une bulle de vapeur et une couche de vapeur sont identiques et occupent tout l'espace entre la surface chauffée et le liquide du réservoir. On souligne qu'en une dimension, l'interface entre les phases est un point et le concept de tension superficielle ne s'applique donc pas (cf. section 3.1.3). Ainsi, pendant la transition de phase, le liquide est converti en vapeur, et la vapeur occupe de plus en plus de place entre la surface chauffée et le liquide. Cette situation est illustrée à la figure 5.1.

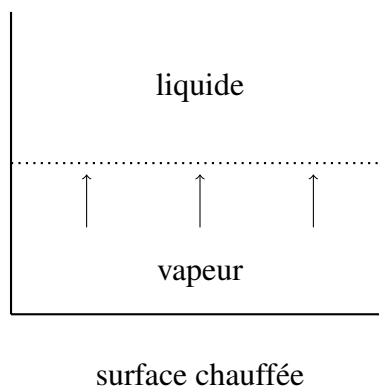


Figure 5.1 Représentation 2D de l'ébullition unidimensionnelle. L'interface entre la phase vapeur et la phase liquide est en trait pointillé.

Pour obtenir la formulation du problème, on place une couche de vapeur dans le fond d'un réservoir chauffé avec un flux de chaleur constant \dot{q}_v . Au-dessus de cette couche de vapeur se trouve une couche de liquide qui est libre d'être évacuée par le sommet du réservoir qui est ouvert. Toutes les paroi du domaine sont isolées ($\mathbf{n} \cdot \nabla T = 0$), à l'exception du fond qui est chauffé. Le liquide est donc libre de sortir du réservoir pour faire place à la vapeur chauffée, et la chaleur introduite dans le réservoir ne peut en sortir que sous forme de flux de masse de la phase liquide vers la phase vapeur. Le fluide est libre de glisser le long des paroi du réservoir. Initialement, la phase vapeur est à la température de saturation T_{sat} et la température de la phase liquide est légèrement en dessous de celle-ci ($T = 0,999 T_{\text{sat}}$) pour permettre au processus de se stabiliser à la bonne température. La géométrie et les conditions limites du problème sont illustrées à la figure 5.2.

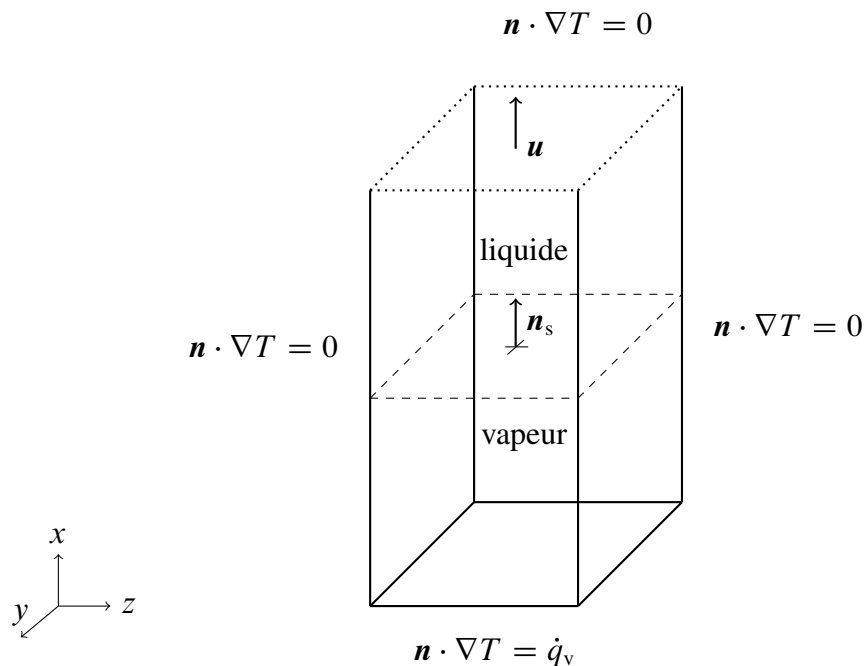


Figure 5.2 Représentation des conditions aux frontières du problème d'ébullition. L'interface entre la phase vapeur et la phase liquide est délimitée par un trait en pointillé.

Dans le cas qui nous intéresse, la physique nous dit que lors de l'ébullition, le liquide demeure à la température de saturation T_{sat} . La chaleur supplémentaire fournie dans le système est emmagasinée sous forme de vapeur qui peut atteindre des températures beaucoup plus grandes que la température de sa phase liquide. L'énergie qui entre dans le domaine par la phase vapeur (\dot{q}_v) doit donc être complètement absorbée à l'interface entre les phases et convertie en un flux de masse (\dot{m}) de la phase liquide vers la phase vapeur. Ceci a pour effet d'augmenter le volume occupé par la phase

vapeur. La phase liquide sera évacuée par l'extrémité ouverte du réservoir. La force motrice qui dicte la dynamique de ce processus est le flux d'énergie \dot{q}_v imposé au réservoir, et le rapport des masses volumiques des phases $\alpha = \frac{\rho_l}{\rho_v}$. Plus \dot{q}_v et α sont grands, plus le phénomène évoluera rapidement.

5.2 Solution exacte

Puisque toutes les paroi du domaine sont isolées et qu'on permet à l'énergie d'entrer à un flux constant \dot{q}_v , ce flux d'énergie sera complètement converti en un flux de masse \dot{m} à l'interface entre les phases. Ceci nous permet d'établir la vitesse de transition de phase $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_s = \dot{q}_v$ (cf. équation (3.27)). Pour obtenir le champ de vitesse complet de l'écoulement, on doit tenir compte de l'expansion de volume de la phase vapeur qui pousse le liquide à sortir.

On suppose que le phénomène n'évolue que dans la direction normale à l'interface entre les phases. Ceci nous permet de développer une solution exacte à caractère unidimensionnel, dans la direction normale à l'interface $\mathbf{n}_s = (1, 0, 0)$. L'interface est initialement placée au milieu du domaine ($x = 0,5$). Cette direction pointe du fond du réservoir vers le sommet ouvert. On a alors le champ de vitesse $\mathbf{u} = (u, 0, 0)$. L'absence de gravité et de tension superficielle joue un rôle important à cet égard. Ceci permet au phénomène de transition de phase de dicter complètement la direction du déplacement et la forme de l'interface. On s'attend donc à ce que le champ de vitesse et le gradient de température n'aient que des composantes non négligeables dans la direction $\mathbf{n}_s = (1, 0, 0)$.

Puisque les phases sont incompressibles, la vitesse des fluides s'obtient directement à l'aide de la divergence du champ de vitesse $\nabla \cdot \mathbf{u} = (\alpha - 1) \dot{q}_v / 2\epsilon$ qu'on intègre à travers la zone de transition entre les phases. Ceci nous donne $\mathbf{u} = ((\alpha - 1) \dot{q}_v, 0, 0)$ dans la phase liquide et $\mathbf{u} = (0, 0, 0)$ dans la phase vapeur. On remarque que cette solution s'obtient aussi à l'aide de la relation de Rankine-Hugoniot (3.24) et que le terme de divergence non nulle représente l'expansion de volume à l'interface lors de la transition de phase, conformément à l'intuition.

Dans la phase liquide, la température doit être constante et égale à la température de saturation T_{sat} . Dans la phase vapeur, elle doit varier linéairement dans la direction de $\mathbf{n}_s = (1, 0, 0)$ ($\nabla^2 T = 0$ puisque $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ dans le liquide) de manière à donner un flux d'énergie constant et égal à \dot{q}_v . Comme l'interface entre les phases se déplace constamment, on utilise la loi de Fourier

$$\dot{q}_v = \frac{T(0, t) - T(\mathbf{x}_s, t)}{\mathbf{x}_s(t) \cdot \mathbf{n}_s} = \frac{T(0, t) - T_{\text{sat}}}{\mathbf{x}_s(t) \cdot \mathbf{n}_s}$$

pour retrouver l'expression exacte

$$T(\mathbf{x}, t) = -\dot{q}_v (\mathbf{x} - \mathbf{x}_s(t)) \cdot \mathbf{n}_s + T_{\text{sat}} \quad (5.1)$$

dans la phase vapeur. Finalement, la pression doit prendre la valeur $p_v = (\alpha - 1)\|\mathbf{u}\|^2$ dans la phase vapeur et $p_\ell = 0$ dans la phase liquide.

5.3 Résultats et discussion

5.3.1 Paramètres de la solution

On résout le système (3.31) avec les nombres adimensionnels $Re = Pe = Ja = 1$. On néglige la force gravitationnelle et la force capillaire. On impose le flux d'énergie $\dot{q}_v = 0,01$ vers la phase vapeur à l'extrémité fermée du domaine et on isole le reste de la frontière du domaine. On choisit le rapport des masses volumiques $\alpha = \frac{\rho_\ell}{\rho_v} = 2$. Avec ces paramètres, la solution exacte est donnée par $\mathbf{u} = \mathbf{v} = (\dot{q}_v, 0, 0)$, $\dot{q}_v = 0,01$ et $p_v = 10^{-4}$. On a $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ partout dans le domaine, sauf dans la zone de transition, où on a $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,05$. Le pas de temps $\Delta t = 0,01$ est utilisé. On prend un maillage structuré formé de tétraèdres pour reproduire l'aspect unidimensionnel du problème. Dans la direction normale à l'interface entre les phases, on utilise trois maillages constitués de 81, 321 et 641 nœuds géométriques. Dans les autres directions, on utilise 5 nœuds géométriques, mais en modifiant leur espacement de manière à conserver un maillage isotrope. La figure 5.3 illustre un de ces maillages structurés. On choisit $\epsilon = 0,1$ comme demi-largeur de la zone de transition, qui demeure constante sur les trois maillages.

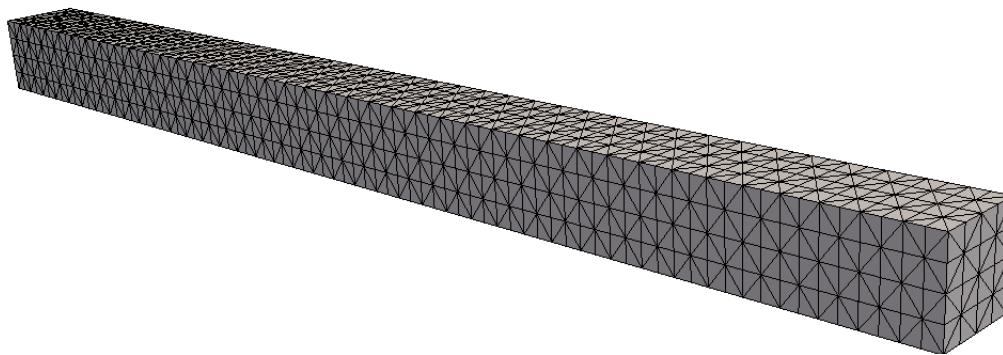


Figure 5.3 Maillage structuré constitué de $81 \times 5 \times 5$ nœuds géométriques.

5.3.2 Analyse des données

La figure 5.4 donne les profils unidimensionnels des variables T , \dot{q} , \mathbf{u} , F , $\nabla \cdot \mathbf{u}$ et P dans la direction de $\mathbf{n}_s = (1, 0, 0)$ au temps $t = 1,00$ s. Le fond chauffé du réservoir est en $x = 0$ et le sommet ouvert est en $x = 1$. On ne présente pas les données dans les autres directions $((0, 1, 0)$ et $(0, 0, 1))$ puisqu'elles ne sont pas significatives. Pour ce qui est de la vitesse $\mathbf{u} = (u, v, w)$, on n'analyse que la composante u puisque l'écoulement et la transition de phase ne se produisent que dans la direction de \mathbf{n}_s . Les composantes en vitesse v et w obtenues sont négligeables.

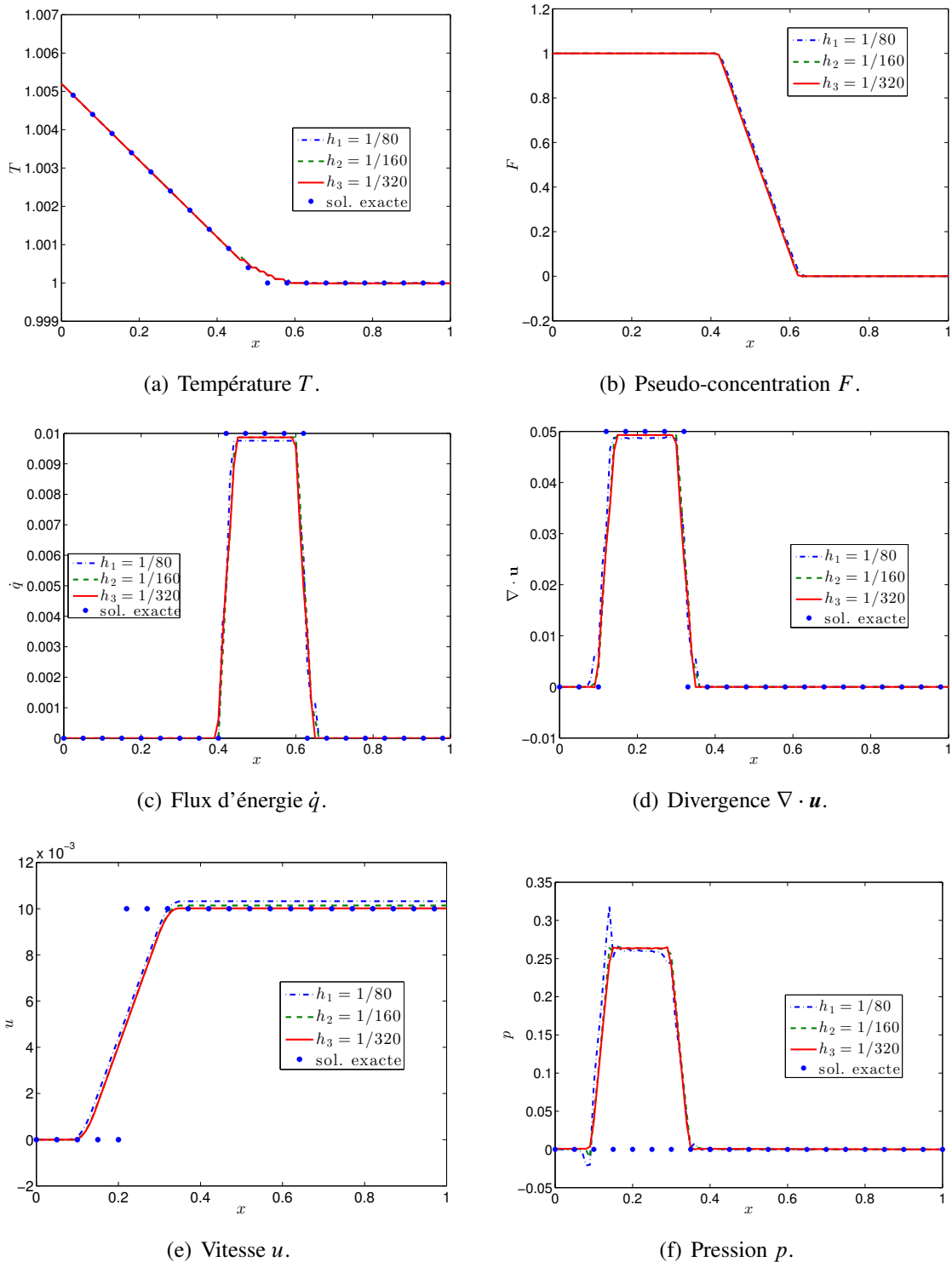


Figure 5.4 Graphes au temps $t = 1,00$ s (a) de la température T , (b) de la pseudo-concentration F , (c) du flux d'énergie \dot{q} , (d) de la divergence du champ de vitesse $\nabla \cdot \mathbf{u}$, (e) du champ de vitesse u et (f) de la pression p à travers le domaine, dans la direction de sortie du fluide. Ces données sont celles qu'on observe en suivant une ligne de courant qui prend la forme d'une droite, soit dans la direction de $\mathbf{n}_s = (1, 0, 0)$.

On remarque d'abord que le profil de température correspond à la solution exacte pour tous les maillages utilisés. On a bien un profil linéaire dans la phase vapeur, donné par l'équation (5.1). Dans la phase liquide, la température se stabilise à la température de saturation avec une erreur relative de l'ordre de 10^{-5} (figure 5.6(b)). On retrouve donc la propriété recherchée d'un liquide qui ne doit pas dépasser la température de saturation lors de l'ébullition. La figure 5.5(b) illustre la température du liquide à sa sortie du réservoir en fonction du temps. On voit qu'après s'être réchauffé jusqu'à la température de saturation, le liquide conserve cette température tout au long de la transition de phase. La figure 5.6 donne l'erreur relative entre les valeurs obtenues et les valeurs exactes à partir du temps $t = 0,5$ s, une fois la phase transitoire initiale terminée.

Les valeurs du flux d'énergie \dot{q} et de la divergence $\nabla \cdot \mathbf{u}$ ont les profils souhaités (figures 5.4(c) et (d)). On rappelle que le terme de flux d'énergie \dot{q} représente le flux d'énergie capturé à l'interface lors de la transition de phase. Or, même si un flux d'énergie est présent à l'entrée du domaine, \dot{q} sert à mesurer le flux d'énergie associé à la transition de phase à l'interface durant le processus. Pour vérifier si \dot{q} et $\nabla \cdot \mathbf{u}$ sont conformes à la solution exacte, on intègre les profils numériquement à l'aide de la méthode du trapèze simple. Le tableau 5.1 donne les valeurs ainsi obtenues. Les valeurs du flux d'énergie \dot{q} capturé à l'interface montrent une erreur relative d'environ 0,5% pour les trois maillages, sans que l'on observe de grandes différences d'un maillage à l'autre. La divergence du champ de vitesse qui résulte de la capture de ce flux d'énergie, et de la reconstruction de l'interface à l'extérieur de la zone de transition, a une erreur relative qui diminue avec la taille du maillage. L'erreur relative est de 3,3% pour $h_1 = \frac{1}{80}$, 1,6% pour $h_2 = \frac{1}{160}$ et 0,1% pour $h_3 = \frac{1}{320}$.

Tableau 5.1 Intégration numérique des termes de flux d'énergie et de divergence du champ de vitesse à travers la zone de transition.

h	\dot{q}	Erreur relative (\dot{q})	$\nabla \cdot \mathbf{u}$	Erreur relative ($\nabla \cdot \mathbf{u}$)
1/80	$2,009 \times 10^{-3}$	0,45%	$1,033 \times 10^{-2}$	3,3%
1/160	$2,004 \times 10^{-3}$	0,20%	$1,016 \times 10^{-2}$	1,6%
1/320	$1,989 \times 10^{-3}$	0,55%	$1,001 \times 10^{-2}$	0,14%

Le profil de la pseudo-concentration correspond à ce qu'on s'attend : $F = 0$ dans la phase liquide et $F = 1$ dans la phase vapeur. À travers la zone de transition, F varie linéairement sans osciller, conformément au modèle linéaire utilisé. Ce profil plus stable de la pseudo-concentration est le résultat souhaité, qui est obtenu en déplaçant le terme de divergence non nulle du champ de vitesse à l'extérieur de la zone de transition. On évite ainsi de déformer la zone de transition durant la transition de phase.

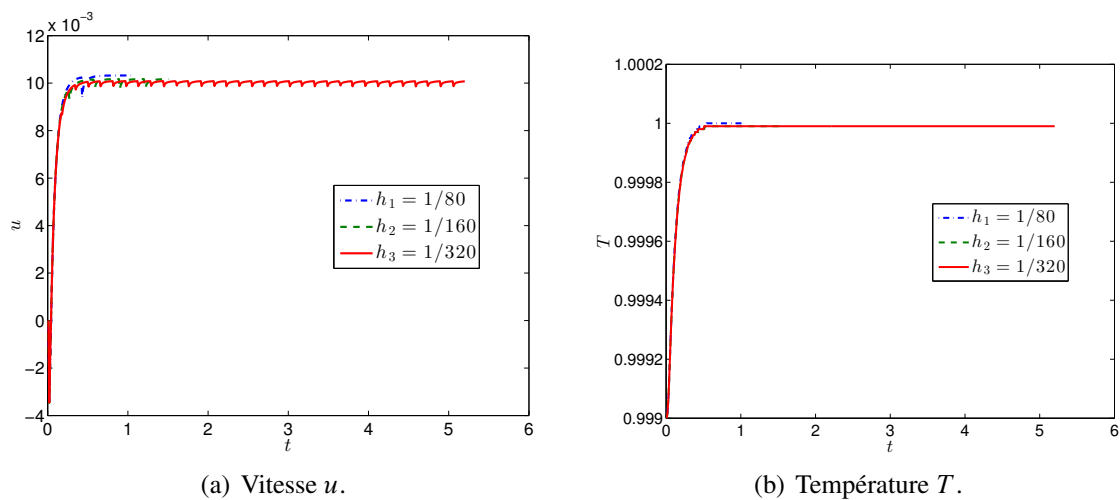


Figure 5.5 Graphes de (a) la composante en vitesse u et (b) la température T en fonction du temps à la sortie du domaine.

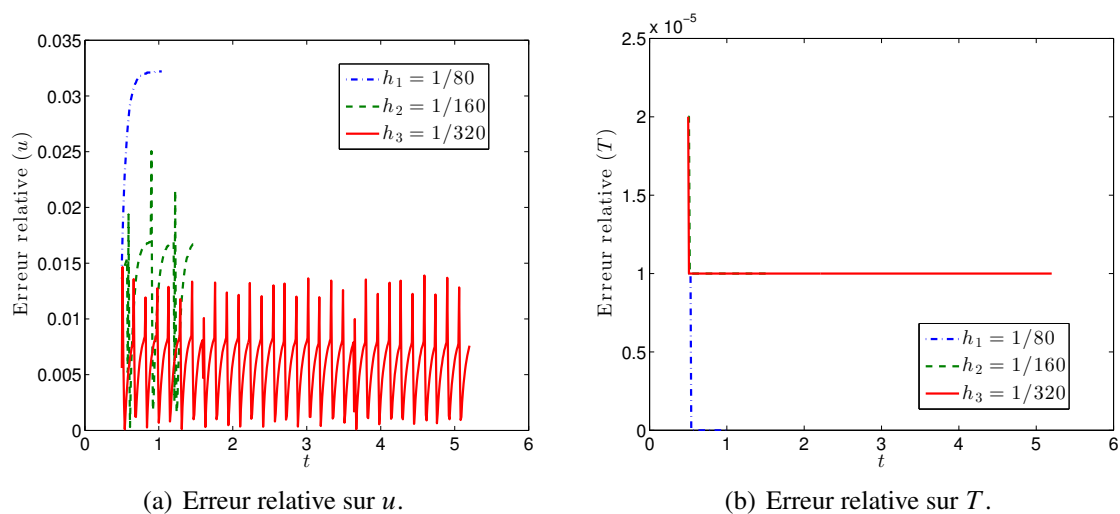


Figure 5.6 Graphes de l'erreur relative de (a) la vitesse u et (b) la température T en fonction du temps à la sortie du domaine à partir du temps $t = 0,5$ s. On ne présente pas les données dans les autres directions ((0, 1, 0) et (0, 0, 1)) puisqu'elles ne sont pas significatives.

Les résultats obtenus en vitesse et en pression sont intéressants. On voit l'effet de la représentation par couche d'éléments de l'interface pour imposer le terme de divergence $\nabla \cdot \mathbf{u}$ non nulle (cf. section 3.6); à chaque fois que l'interface croise une nouvelle couche d'éléments, le terme de divergence se déplace aussi et crée une variation brusque de la vitesse et de la pression dans l'écoulement. La figure 5.5(a) illustre la vitesse du liquide à sa sortie du réservoir dans le temps. La figure 5.6(a) donne l'erreur relative entre les valeurs obtenues et les valeurs exactes à partir du temps $t = 0,5$ s.

On remarque que l'erreur relative sur la vitesse dans la phase liquide, à sa sortie du réservoir, est d'un peu moins de 3,5% pour le maillage le plus grossier ($h_1 = \frac{1}{80}$) et un peu moins de 1,5% pour le maillage le plus fin ($h_3 = \frac{1}{320}$). On étudie la convergence de la solution en comparant l'erreur sur la vitesse dans la phase liquide en fonction de la taille du maillage h . La figure 5.7 présente cette erreur pour les trois maillages. On peut voir que la solution éléments-finis u_h semble converger quadratiquement vers la solution exacte u au temps $t = 1$.

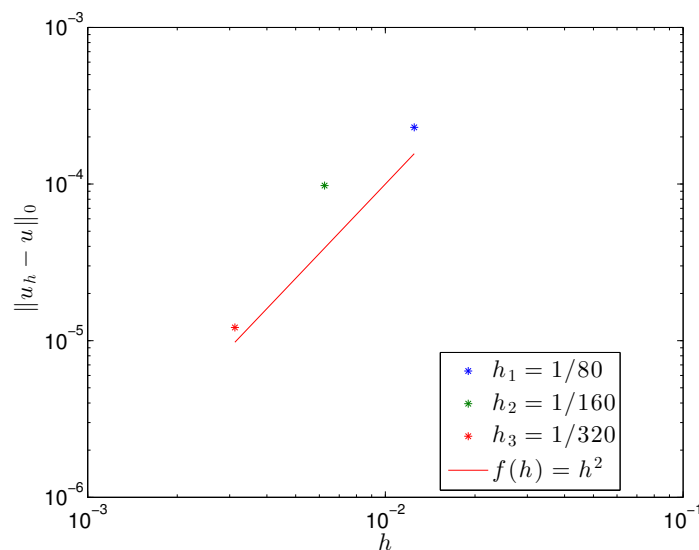


Figure 5.7 Analyse de convergence sur u pour $h_1 = \frac{1}{80}$, $h_2 = \frac{1}{160}$ et $h_3 = \frac{1}{320}$. La fonction $f(h) = h^2$ est ajoutée en référence pour illustrer une convergence quadratique.

La pression subit une impulsion considérable (figure 5.4(f)) dans la zone de transition reconstruite, où la divergence de la vitesse est non nulle (cf. section 3.6). Intuitivement, cette impulsion est liée au flux de masse causé par la transition de phase (Juric, 1996). On pourrait introduire un terme supplémentaire dans l'équation de conservation de quantité de mouvement (3.14), comme le suggère Juric (1996). Toutefois, cette approche ne semble pas fonctionner pour notre modèle, qui tient déjà compte de l'effet d'un terme de divergence non nulle dans l'équation de conservation de quantité

de mouvement (3.14). On remarque qu'à environ $x = 0.1$ la pression subit un surdépassement. Ce comportement est moins important quand on raffine le maillage. On devra investiguer davantage pour bien en comprendre la cause.

On note que le plus gros problème rencontré concerne la convergence des itérations de la méthode de point fixe à chaque pas de temps (cf. section 4.3). Les itérations stagnent après quelques centaines de pas de temps (104 pas de temps pour $h_1 = \frac{1}{80}$, 151 pas de temps pour $h_2 = \frac{1}{160}$ et 520 pas de temps pour $h_3 = \frac{1}{320}$), ce qui veut dire que la méthode de point fixe n'arrive pas à trouver une solution avec suffisamment de précision. On constate toutefois que ce problème devient de moins en moins important lorsqu'on raffine le maillage. On peut donc en conclure qu'on peut éviter ce problème avec un maillage suffisamment raffiné. Finalement, on a reproduit ces résultats avec l'élément de Taylor-Hood (quadratique en vitesse et linéaire continu en pression), mais aucune différence significative n'a été remarquée dans les résultats. On peut donc en conclure que les difficultés concernant la convergence des itérations de la méthode de point fixe proviennent du modèle. Comme le temps de calcul est moindre avec des éléments linéaires en vitesse et constants par élément en pression (cf. section 4.3), on préfère utiliser ces derniers.

CHAPITRE 6 CONCLUSION

6.1 Synthèse des travaux

L'objectif principal de ce mémoire était de modéliser le phénomène de transition de phase. Pour atteindre cet objectif, on s'est guidé des objectifs spécifiques suivants :

1. Étudier les modèles de transition de phase existants pour en dégager les caractéristiques et les difficultés de mise en œuvre ;
2. Développer un modèle de transition de phase basé sur la méthode eulérienne de capture de l'interface dans le cadre d'une discrétisation à l'aide de la méthode des éléments finis ;
3. Implémenter et vérifier le modèle numérique développé.

Au chapitre 3, un modèle pour les écoulements à surface libre avec transition de phase a été présenté. Ce modèle est applicable à tout écoulement multifluide où les phases sont incompressibles et immiscibles. De plus, une solution originale est présentée pour éviter la déformation de la zone de transition entre les fluides durant la transition de phase (cf. section 3.6.2). Au chapitre 5, on a proposé un problème de vérification pour lequel la solution exacte est connue. Les résultats obtenus ont permis de vérifier le modèle développé au chapitre 3, dans le cas où on néglige la force gravitationnelle et la tension superficielle.

6.2 Limitations de la solution proposée et pistes de solutions

La principale limitation de la solution proposée est liée à la représentation et à l'imposition des flux d'énergie durant la transition de phase (cf. section 3.6). Il est difficile d'imposer ces flux en une région restreinte du domaine, car ils génèrent des discontinuités dans les solutions (cf. figure 5.4). À cause de ces discontinuités, on constate qu'il est difficile d'augmenter le flux d'énergie imposé à la frontière du domaine et de réduire la largeur de la zone de transition entre les phases. Ces difficultés s'expliquent par la quantité d'énergie qui est captée à l'interface. Pendant la transition de phase, une certaine quantité d'énergie passe d'une phase à l'autre à travers l'interface. Cette quantité d'énergie est définie par le volume qu'occupe la zone de transition et l'amplitude du flux d'énergie imposé à la frontière du domaine. Or, une zone de transition plus étroite se traduit par un flux d'énergie plus intense à l'interface. Plus le flux d'énergie est intense, plus la solution numérique du système (3.31) aura tendance à osciller, ce qui introduit des instabilités numériques. On doit donc identifier une méthode qui permet de traiter ces flux d'énergie à l'interface.

On a trouvé que la représentation de l'interface par un couche d'éléments (cf. section 3.6) est trop grossière pour identifier et imposer les termes de flux d'énergie dans le domaine. Les sauts de vitesse et de pression à l'interface (cf. figure 5.4) se déplacent à travers le domaine en suivant la couche d'éléments qui représente l'interface. Comme cette couche d'éléments ne bouge que quand l'interface passe d'un élément à un autre, les sauts de vitesse et de pression passent directement d'un élément à un autre lorsqu'on avance dans le temps, pour suivre la couche d'éléments où ces sauts sont définis. Ce comportement engendre des discontinuités dans le temps, car les sauts de vitesse et de pression n'évoluent pas de manière assez progressive à travers les éléments, ce qui nuit à la convergence des itérations de la méthode de point fixe (cf. section 4.3). Pour surmonter ce problème, on devra utiliser une représentation de l'interface à l'aide des nœuds géométriques (ou des nœuds de calcul) du maillage, ce qui permettra une localisation plus précise de l'interface à l'intérieur des éléments. De cette manière, on aura une évolution plus régulière des sauts de vitesse et de pression à travers le domaine. Aussi, la taille de la zone de transition doit être réduite pour permettre à l'interface de se déformer aux plus petites échelles et pour permettre une évolution plus régulière à travers le domaine de calcul.

Pour améliorer l'utilisation de la pseudo-concentration et la représentation des discontinuités des variables à travers l'interface, on pourrait suivre la recommandation de Rivard (2012) en explorant l'utilisation d'une méthode de Galerkin discontinue. Cette méthode semble faire ses preuves pour la coalescence et le transport de bulles, et pourrait être une meilleure stratégie que la méthode SUPG employée ici (Law-Kam Cio, 2014).

Le modèle présenté ici suppose une température de saturation (T_{sat}) constante. Pour tenir compte de l'effet des variations de la pression et de l'énergie à la surface libre sur T_{sat} , on peut s'inspirer de Juric et Tryggvason (1998) qui présentent la condition de Gibbs-Thomson qui permet d'évaluer ces variations de T_{sat} . On serait alors en mesure d'obtenir une description plus réaliste du phénomène, où les déformations topologiques seraient influencées par ces variations.

6.3 Développements futurs

D'abord, on souligne que le modèle doit encore être validé à l'aide de simulations de transitions de phase réalistes. Une première validation s'obtiendra en ajoutant la force gravitationnelle et la tension superficielle au problème décrit au chapitre 5. Toutefois, avant d'être en mesure d'entreprendre cette étape, on doit s'attaquer aux problèmes décrits à la section 6.2 afin d'obtenir une résolution plus stable.

Pour approfondir l'étude d'un problème particulier, on doit ajouter au modèle développé les restrictions qui s'imposent. On peut prendre en exemple le problème d'ébullition nucléée où des bulles

de vapeur se forment à la paroi avant de grossir et de se détacher pour faire leur ascension dans le liquide pour libérer l'énergie de la paroi chauffée (cf. chapitre 1). Ce phénomène est la première étape du problème d'ébullition qu'on retrouve dans tout processus d'échange de chaleur d'un élément chauffant dans un liquide bouillant (Ruyer, 2006). On pourrait alors faire l'étude des différents régimes d'ébullition et mieux comprendre l'efficacité des transferts d'énergie. On pourrait aussi introduire des modèles qui nous permettraient d'inclure les effets des variations de température sur les propriétés physiques des phases telles que la viscosité, la conductivité thermique et la chaleur latente. Par exemple, comme suggéré à la section 3.4, on pourrait utiliser l'approximation de Boussinesq pour inclure les effets des variations de température sur la masse volumique des phases. Dans le même ordre d'idées, au lieu de considérer des phases incompressibles, on pourrait utiliser un modèle où les deux phases sont compressibles ou bien un modèle où seulement la phase liquide est incompressible. Un tel choix de modélisation peut prendre plusieurs directions et peut devenir plus complexe à mettre en oeuvre, mais semble être une suite naturelle à l'étude présentée ici.

Une autre façon de poursuivre la présente étude serait d'étendre le modèle au phénomène de cavitation, qui est aussi une transition de phase. La différence principale est qu'au lieu de produire une transition de phase en faisant varier la température du fluide, on produit une transition de phase en faisant varier la pression dans l'écoulement. L'étude de ce phénomène est particulièrement importante pour les écoulements où un changement important se produit dans la vitesse d'écoulement. On prend en exemple un écoulement à haute pression dans un tuyau où une valve est présente (Dudlik et al., 2002), un écoulement à travers une turbine hydraulique (Arne, 2001) ou un écoulement à travers une pompe centrifuge (Limbach et al., 2016). L'implosion des bulles de vapeur sur les parois de l'équipement peut produire des dégâts importants et du bruit considérable.

RÉFÉRENCES

- ANJOS, G., MANGIAVACCHI, N., BORHANI, N. et THOME, J. (2014). 3D ALE finite-element method for two-phase flows with phase change. *Heat Trans. Eng.*, 35, 537–547.
- ARNE, K. (2001). *Hydropower in Norway. Mechanical Equipment*. Trondheim : Norwegian University of Science and Technology.
- BENSON, D. (1989). An efficient, accurate, simple ALE method for nonlinear finite element programs. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 72, 305–350.
- BENSON, D. (1992). Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 99, 235–394.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E. et LIGHTFOOT, E. N. (2002). Transport phenomena. 2nd. *New York*.
- BRACKBILL, J., KOTHE, D. B. et ZEMACH, C. (1992). A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100, 335–354.
- BREZZI, F. (1974). On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers. *Revue française d'automatique, informatique, recherche opérationnelle. Analyse numérique*, 8, 129–151.
- BROOKS, A. et HUGHES, T. (1982). SUPG formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier–Stokes equations. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 32, 199–259.
- CAN, E. et PROSPERETTI, A. (2012). A level set method for vapor bubble dynamics. *J. Comput. Phys.*, 231, 1533–1552.
- DARU, V., DULUC, M.-C., LE MAÎTRE, O., JURIC, D. et LE QUÉRÉ, P. (2006). Modélisation et simulation numérique du changement de phase liquide–vapeur en cavité. *Comptes Rendus Mécanique*, 334, 25–33.
- DUDLIK, A., SCHONFELD, S., SCHLUTER, S., FAHLENKAMP, H. et al. (2002). Prevention of water hammer and cavitation hammer in pipeline systems. *Chem. Eng. & Tech.*, 25, 888–890.
- DUFOUR, S. (1999). *Méthodes d'éléments finis adaptatives pour les écoulements multifluides*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal.
- ESMAEELI, A. et TRYGGVASON, G. (2004a). Computations of film boiling. Part I : numerical method. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 47, 5451 – 5461.
- ESMAEELI, A. et TRYGGVASON, G. (2004b). Computations of film boiling. Part II : multi-mode film boiling. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 47, 5463 – 5476.

- ESMAEELI, A. et TRYGGVASON, G. (2004c). A front tracking method for computations of boiling in complex geometries. *Int. J. Mult. Flow*, 30, 1037 – 1050. A collection of papers in honor of Professor G. Yadigaroglu on the occasion of his 65th birthday.
- FRIES, T. et MATTHIES, H. (2004). A review of Petrov–Galerkin stabilization approaches and an extension to meshfree methods. *Technische Universitat Braunschweig, Brunswick*.
- HANAFIZADEH, P., GHARAHASANLO, M., AHMADI, S., ZERAATI, S. et AKHAVAN-BEHABADI, M. (2016). Numerical investigation of EHD effects on heat transfer enhancement and flow pattern of R-134a two phase flow. *J. Elect.*, 82, 63–71.
- HARDT, S. et WONDRA, F. (2008). Evaporation model for interfacial flows based on a continuum-field representation of the source terms. *J. Comput. Phys.*, 227, 5871–5895.
- HUNG, N. (1979). On the formulation of constitutive laws required to describe two-phase flow models. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 6, 513–518.
- HYSING, S. (2008). *Numerical simulation of immiscible fluids with FEM level set techniques*. Thèse de doctorat.
- ISHII, M. (1975). Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow. *NASA STI/Recon Technical Report A*, 75.
- ISHII, M. et HIBIKI, T. (2011). *Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow*. Springer, seconde édition.
- JAMET, D., LEBAIGUE, O., COUTRIS, N. et DELHAYE, J. (2001). The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid–vapor flows with phase change. *J. Comput. Phys.*, 169, 624–651.
- JURIC, D. (1996). *Computations of phase change*. Thèse de doctorat, The National Aeronautics and Space Administration.
- JURIC, D. et TRYGGVASON, G. (1998). Computations of boiling flows. *Int. J. Mult. Flow*, 24, 387 – 410.
- KANDLIKAR, S. (2012). History, advances, and challenges in liquid flow and flow boiling heat transfer in microchannels : a critical review. *J. Heat Trans.*, 134.
- KANG, M., FEDKIW, R. et LIU, X. (2000). A boundary condition capturing method for multi-phase incompressible flow. *J. Scient. Comput.*, 15, 323–360.
- LAW-KAM CIO, Y. (2014). *Mise en œuvre d'un solveur de Galerkin discontinu pour la modélisation d'écoulements à surfaces libres viscoélastiques tridimensionnels*. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.
- LEE, W., SON, G. et JEONG, J. (2010). Numerical analysis of bubble growth and departure from a microcavity. *Num. Heat Trans., Part B : Fundamentals*, 58, 323–342.

- LIMBACH, P., MÜLLER, T., BLUME, M. et SKODA, R. (2016). Numerical and experimental investigation of the cavitating flow in a low specific speed centrifugal pump and assessment of the influence of surface roughness on head prediction.
- MÉNARD, T., TANGUY, S. et BERLEMONT, A. (2007). Coupling level set/VOF/ghost fluid methods : Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet. *Int. J. Mult. Flow*, 33, 510–524.
- MEYER, R. (1971). *Introduction to mathematical fluid dynamics*, vol. 24. Courier Corporation.
- OSHER, S. et FEDKIW, R. P. (2001). Level set methods : an overview and some recent results. *J. Comput. Phys.*, 169, 463–502.
- PANDEY, V., BISWAS, G. et DALAL, A. (2016). Effect of superheat and electric field on saturated film boiling. *Phys. Fluids*, 28, 052102.
- RAVIART, P. (1981). *Les méthodes d'éléments finis en mécanique des fluides*. Editions Eyrolles.
- RIVARD, R. (2012). *Simulation des grandes échelles appliquée à la modélisation des écoulements turbulents à surface libre*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal.
- RUYER, P. (2006). *Modèle de champ de phase pour l'étude de l'ébullition*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique X.
- SETHIAN, J. (1999). *Level set methods and fast marching methods : evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science*, vol. 3. Cambridge university press.
- SHIN, S., ABDEL-KHALIK, S. et JURIC, D. (2005). Direct three-dimensional numerical simulation of nucleate boiling using the level contour reconstruction method. *Int. J. Mult. Flow*, 31, 1231 – 1242.
- SIEDEL, S., CIOULACHTJIAN, S., ROBINSON, A. et BONJOUR, J. (2016). Lateral coalescence of bubbles in the presence of a DC electric field. *Int. Comm. Heat Mass Trans.*, 76, 127–132.
- SON, G. et DHIR, V. (2008). Numerical simulation of nucleate boiling on a horizontal surface at high heat fluxes. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 51, 2566–2582.
- TANGUY, S., MÉNARD, T. et BERLEMONT, A. (2007). A level set method for vaporizing two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 221, 837–853.
- THOMPSON, E. (1986). Use of pseudo-concentrations to follow creeping viscous flows during transient analysis. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 6, 749–761.
- TRYGGVASON, G., ESMAEELI, A. et AL-RAWAHI, N. (2005). Direct numerical simulations of flows with phase change. *Comp. & Struct.*, 83, 445–453.
- TRYGGVASON, G., SCARDOVELLI, R. et ZALESKI, S. (2011). *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge University Press.

UDAYKUMAR, H., MITTAL, R. et SHYY, W. (1999). Computation of solid–liquid phase fronts in the sharp interface limit on fixed grids. *J. Comput. Phys.*, 153, 535 – 574.

UNVERDI, S. et TRYGGVASON, G. (1992). A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *J. Comput. Phys.*, 100, 25–37.

VOLLER, V., LEWIS, R., POSTEK, E., HAN, Z. et GETHIN, D. (2006). A finite element model of the squeeze casting process. *Int. J. Num. Meth. Heat & Fluid Flow*, 16, 539–572.

YAP, Y., CHAI, J., WONG, T., TOH, K. et ZHANG, H. (2006). A global mass correction scheme for the level-set method. *Num. Heat Trans., Part B : Fundamentals*, 50, 455–472.

YARIN, L., MOSYAK, A. et HETSRONI, G. (2008). *Fluid flow, heat transfer and boiling in micro-channels*. Springer Science & Business Media.