

Titre: Développement, implémentation et étalonnage d'un modèle fluide à interface diffuse pour la simulation d'écoulements polyphasiques
Title: Development, implementation and calibration of a fluid interface model for multiphase flow simulation

Auteur: Pierre Joseph Éric Laurentin
Author:

Date: 2024

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Laurentin, P. J. É. (2024). Développement, implémentation et étalonnage d'un modèle fluide à interface diffuse pour la simulation d'écoulements polyphasiques
Citation: [Mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal]. PolyPublie.
<https://publications.polymtl.ca/59203/>

Document en libre accès dans PolyPublie

Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/59203/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Bruno Blais
Advisors:

Programme: Génie chimique
Program:

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

**Développement, implémentation et étalonnage d'un modèle fluide à interface
diffuse pour la simulation d'écoulements polyphasiques**

PIERRE JOSEPH ÉRIC LAURENTIN
Département de génie chimique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
Génie chimique
Août 2024

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

Développement, implémentation et étalonnage d'un modèle fluide à interface diffuse pour la simulation d'écoulements polyphasiques

présenté par **Pierre Joseph Éric LAURENTIN**
en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Julian SELF, président

Bruno BLAIS, membre et directeur de recherche

Cédric BÉGUIN, membre

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier très chaleureusement mon directeur de recherche, le professeur Bruno Blais pour son soutien et ses encouragements tout au long de ce projet de maîtrise. J'ai beaucoup appris à ses côtés, et ce dès notre première entrevue où j'ai appris mes premiers mots de québécois ! Son côté humain, son humour et l'enthousiasme avec lequel il partage ses connaissances ont largement contribué à mon épanouissement pendant ma maîtrise, un grand merci à toi Bruno.

Je veux aussi remercier particulièrement celles et ceux qui ont rendu mon quotidien si joyeux au laboratoire : Amishga, merci pour tes mots d'encouragement et ta bonne humeur communicative, Lucka pour m'avoir accompagné dès mon arrivée au labo, Ghazaleh pour ta *sassiness*, mais aussi Olique, Toni, Mikael, Gabo, Paul (soit indulgent sur les fautes si tu relis ce document), Valérie, Laura, Keven, Cléo, Justin, Soki, Hélène, Audrey, William (*aka* trail-man), Victor, Oreste et Wiebke.

En parlant de quotidien, il ne serait pas le même sans mes chers coloccs, Brégeot, Evan, Nathan et Raph, merci à vous gang.

Merci à toute l'équipe de The Room de m'avoir maintenu en forme tout au long de ce projet : Enzo, Jules dit *biomécaniquement optimisé*, Louis et Nadir mes compagnons de simulation numérique et Thibaud. Merci également à mes camarades de volleyball : Amiel (supplément duo de beach-volley !), Alexandre et Pierre.

Papa et Maman, merci de m'avoir toujours encouragé et soutenu dans la poursuite de mes études, même quand c'était pour partir à plus de 5000 km de la maison... Vous ainsi qu'Aliénor, Faustine, Louis et Léon me manquez terriblement !

Merci à mon école CentraleSupélec de m'avoir donné l'opportunité de continuer mes études à l'étranger et plus généralement à tous les acteurs qui ont contribué à l'accomplissement de ce projet : Polytechnique Montréal et l'Alliance de Recherche Numérique du Canada pour les ressources en calcul.

Finalement, je tiens à remercier tout particulièrement Manon, merci du fond du cœur pour ton soutien indéfectible, tu fais mon bonheur au quotidien.

Je finis ces remerciements par une pensée émue pour Grand-Maman.

RÉSUMÉ

Les systèmes polyphasiques sont présents en abondance dans une large gamme de domaines scientifiques et techniques. La santé, les procédés industriels et la science du climat sont autant de cas où la compréhension des écoulements à plusieurs phases est nécessaire : pour mieux comprendre le corps humain, optimiser les procédés ou prévoir l'évolution du climat. Les méthodes numériques pour simuler ces écoulements polyphasiques abondent, et parmi celles-ci, les méthodes à interface diffuse sont d'un intérêt particulier. On a choisi de s'intéresser à un type d'écoulement polyphasique ; les écoulements biphasiques à phase dispersée, en régime idéalement séparé. Pour la simulation, un modèle basé sur le système d'équations couplées de Cahn-Hilliard-Navier-Stokes (CHNS) a été choisi. Cette approche, moins populaire que les autres méthodes à interface diffuse, présente pourtant des avantages non-négligeables, comme la gestion des changements topologiques complexes sans avoir besoin de procédure de reconstruction ou de redistanciation. Ceci la rend très attractive pour les types de problèmes auxquels on s'intéresse.

On se donne pour objectif de développer, d'implémenter et d'étalonner la méthode CHNS pour être capable de simuler des écoulements polyphasiques. On utilisera comme cadre numérique le logiciel en libre-accès de mécanique des fluides numérique Lethe, qui utilise la méthode des éléments finis et au sein duquel on implémentera le modèle.

La première étape est l'implémentation et la vérification du modèle Cahn-Hilliard (CH). Au préalable, on écrit la forme faible puis on résout le système non-linéaire et transitoire qui en découle. Cela nous permet d'appliquer la méthode des solutions manufacturées (MSM) puis de simuler un cas de décomposition spinodale pour vérifier la partie CH de la résolution. On accompagne cette étape d'une première discussion sur le paramétrage des équations, notamment le réglage de l'épaisseur d'interface, ε , et du coefficient de mobilité D .

Assurés du fonctionnement du système CH, on entreprend ensuite le couplage avec les équations de Navier-Stokes (NS) pour simuler des écoulements à proprement parler. Le défi ici est d'écrire les équations de couplage et de les implémenter dans Lethe. Puis, de nombreux cas test sont simulés afin de vérifier le couplage et pour s'assurer que les mécanismes classiques de mécanique des fluides polyphasique sont correctement simulés. On veut notamment retrouver le saut de pression à l'interface entre deux fluide, inclure les forces de tension de surface aux systèmes, contraindre le fluide par des conditions d'angles de contact aux paroi, le tout pour des interfaces simples et complexes

Ceci mène finalement à la simulation d'un cas industriel de détachement de bulle en pré-

sence d'un écoulement fluide cisaillant. On y présente une analyse de convergence de grille qui précède un balayage paramétrique sur les propriétés physiques du liquide environnant. Ce problème et les tests effectués précédemment permettent de tirer des conclusions éclairentes sur les forces et faiblesses du modèle CHNS, ainsi que les cas d'utilisation à privilégier. De plus, la majorité des résultats obtenus sont comparés à d'autres modèles de simulation utilisant des méthodes de capture de front, tel que les modèles Volume of Fluid (VoF) ou Level Set (LS)), ou des méthodes de suivi de front, tel que le modèle de Local Front Reconstruction Method (LFRM). Cette diversité dans les modèles auquel on confronte les résultats permettent une comparaison très générale. Les résultats suggèrent que le modèle CHNS se prête très bien à la simulation d'écoulements polyphasiques à phase séparée grâce à sa capacité à gérer les changements topologiques complexes, notamment aux ruptures d'interface. Aussi, la possibilité de simuler le mouvement de lignes de contact fait penser que le modèle serait particulièrement adapté aux problèmes de microfluidique. D'un point de vue numérique, le modèle CHNS est très attractif grâce au terme diffusif qui est naturellement présent dans l'équation du champ de phase, qui stabilise les équations et amortit les oscillations liées au terme advectif. Il reste néanmoins des points à éclaircir, notamment le paramétrage des équations qui est pour l'instant extrêmement dépendant du problème traité. Malgré des travaux éclairants sur le réglage des paramètres dans les dernières années, bien souvent, plusieurs simulations sont nécessaires avant de trouver les bons paramètres. On note aussi une littérature scientifique dispersée où chaque auteur adapte le modèle à ses besoins, ainsi, on dénombre plus d'une vingtaine de formulations différentes pour le couplage CHNS.

En conclusion, ce projet a permis d'implémenter le modèle CHNS dans Lethe et de se familiariser avec le réglage de ses paramètres, ses performances ayant été minutieusement vérifiées. On note aussi que Lethe dispose d'un modèle VOF qui a permis, et permettra à l'avenir de dresser une comparaison modèle à modèle très précise, dans le même contexte numérique.

ABSTRACT

Multiphase systems are abundantly present in a wide range of scientific and technical fields. Health, industrial processes and climate science are just some of the areas where understanding multiphase flows is necessary. Numerical methods for simulating these multiphase flows abound, and among these, diffuse interface methods are of particular interest. We have chosen to focus on one type of multiphase flow: two-phase flows with a dispersed phase, in an ideally separated regime. For the simulation, a model based on the coupled Cahn-Hilliard-Navier-Stokes (CHNS) system of equations was chosen. This approach, which is less popular than other diffuse interface methods, nevertheless offers significant advantages. In particular, it can handle complex topological changes without the need for reconstruction or redistancing procedures. This makes it very attractive for the types of problems we're interested in.

The aim is to develop, implement and calibrate the CHNS method for simulating multiphase flows. The numerical framework used will be Lethe, an open-source computational fluid mechanics software package based on the finite element method, within which the model will be implemented.

The first step is to implement and verify the Cahn-Hilliard (CH) model. First, we write the weak form and then solve the resulting nonlinear and transient system. This allows us to apply the method of manufactured solutions (MMS) and then simulate a spinodal decomposition case to verify the CH part of the resolution. Then, we discuss the parameterization of the equations, in particular the setting of the interface thickness, ε and the mobility coefficient D .

With a functional CH system, we then proceed to the coupling with the Navier-Stokes (NS) equations to simulate actual flows. The challenge here is to write the coupling equations and implement them in Lethe. Numerous test cases are then simulated to verify the coupling and to ensure that the classical mechanisms of multiphase fluid mechanics are adequately represented: pressure jump at the interface, management of surface tension, contact angles, for simple and complex interfaces.

This finally leads to the simulation of an industrial case of bubble detachment in the presence of a shear flow. A grid convergence analysis is presented, which precedes a parametric sweep of the physical properties of the surrounding fluid. This problem and the tests carried out previously enable us to draw some enlightening conclusions about the strengths and weaknesses of the CHNS model, as well as the preferred use cases. In addition, most of the results obtained are compared with other multiphase simulation models using front cap-

turing method (Volume of Fluid (VoF) or Level Set (LS)) or front tracking method (Local Front Reconstruction Method (LFRM)), enabling a very general comparison. The results suggest that the model is highly suitable to the simulation of phase-separated multiphase flows, thanks to its ability to handle complex topological changes, particularly at interface breaks. Also, the ability to simulate the movement of contact lines suggests that the model would be particularly well suited to microfluidic problems. From a numerical point of view, the CHNS model is very attractive thanks to the diffusive term naturally present in the phase field equation, which stabilizes the equations and dampens oscillations linked to the advective term. However, there are still a number of points to be clarified, notably the parameterization of the equations. It is currently extremely dependent on the problem being addressed, and often requires several simulations before the right parameters are found, despite some enlightening work on the subject in recent years. The scientific literature is also scattered, with each author adapting the model to his or her own needs, and there are more than twenty different formulations of the CHNS coupling.

In conclusion, this project has enabled us to implement the CHNS model in Lethe and to familiarize ourselves with its parameter settings, while its performance has been thoroughly verified. It should also be noted that Lethe has a VOF model which would allow for a very accurate model-to-model comparison in the same numerical context, in the future.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	iii
RÉSUMÉ	iv
ABSTRACT	vi
TABLE DES MATIÈRES	viii
LISTE DES TABLEAUX	xi
LISTE DES FIGURES	xii
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xix
LISTE DES VARIABLES, SYMBOLES ET NOTATIONS	xx
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	3
2.1 Généralités sur les écoulements polyphasiques	3
2.1.1 Définitions et types de problèmes	3
2.1.2 Écoulements liquide-gaz	4
2.2 Théorie des écoulements polyphasiques	6
2.2.1 Mécanique des milieux continus	6
2.2.2 Mouvement d'un fluide : approches Eulérienne et Lagrangienne	7
2.2.3 Contraintes dans un fluide	8
2.2.4 Équations de Navier-Stokes	9
2.3 Équations de Navier-Stokes polyphasiques	10
2.3.1 Modèle à deux fluides	11
2.3.2 Modèle continu	12
2.3.3 Discussion et choix du modèle	14
2.4 Méthodes continues	15
2.4.1 Méthode Volume Of Fluid	15
2.4.2 Méthode Level Set	17
2.4.3 Conclusion partielle	19
2.5 Modèle de Cahn-Hilliard	19

2.5.1	Équations de Cahn-Hilliard	20
2.5.2	Propriétés des équations de Cahn-Hilliard	23
2.6	Modèle de Cahn-Hilliard-Navier-Stokes	24
2.6.1	Force de tension de surface	25
2.6.2	Flux relatif diffusif	26
2.7	Éléments de résolution numérique	26
2.7.1	Méthode des éléments finis	27
2.7.2	Problèmes transitoires et non-linéaires	32
2.7.3	Résolution du système linéaire	33
2.7.4	Synthèse des éléments numériques	33
2.8	Synthèse de la revue de littérature et lignes directrices	34
CHAPITRE 3	OBJECTIF ET ORGANISATION	36
3.1	Objectif du travail de recherche	36
3.2	Organisation du mémoire	36
CHAPITRE 4	MÉTHODOLOGIE	38
CHAPITRE 5	MODÈLE DE CAHN-HILLIARD	40
5.1	Rappel des équations	40
5.2	Résolution numérique des équations	41
5.2.1	Formulation faible du problème	41
5.2.2	Discrétisation du problème	42
5.2.3	Résolution du problème transitoire et non-linéaire	42
5.2.4	Paramétrage de ε et D	44
5.3	Vérification : méthode des solutions manufacturées	48
5.4	Décomposition spinodale	51
CHAPITRE 6	MODÈLE DE CAHN-HILLIARD-NAVIER-STOKES	54
6.1	Rappel des équations	54
6.2	Résolution numérique des équations	55
6.2.1	Stratégie de couplage	55
6.2.2	Formulation faible du problème	55
6.2.3	Résolution du problème	56
6.2.4	Stabilisation des équations de Navier-Stokes	57
6.3	Simulation de cas classiques	58
6.3.1	Bulle statique, saut de pression et courants parasites en 2D	59

6.3.2	Rupture de digue : action de la gravité sur une interface simple	62
6.3.3	Instabilité de Rayleigh-Taylor : action de la gravité avec une interface complexe	65
6.3.4	Loi de Jurin : montée capillaire et angle de contact	67
6.3.5	Oscillations 2D de bulles	71
6.3.6	Bulle montante 2D	75
6.4	Détachement de bulles en flux de cisaillement	79
6.4.1	Introduction	79
6.4.2	Méthodologie de l'exemple	79
6.4.3	Définition des paramètres	81
6.4.4	Analyse de convergence en maillage	85
6.4.5	Résultats	87
CHAPITRE 7 DISCUSSION GÉNÉRALE		101
7.1	Forces du modèle CHNS	101
7.2	Faiblesses du modèle CHNS	102
CHAPITRE 8 CONCLUSION		103
8.1	Synthèse des travaux	103
8.2	Limitations de la solution proposée	104
8.3	Améliorations et travaux futurs	104
8.4	Un petit mot pour la fin	105
RÉFÉRENCES		106

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 6.1	Valeurs du coefficient de mobilité en fonction du rayon initial de la bulle	60
Tableau 6.2	Temps de détachement et volume au détachement pour différentes va- leurs du coefficient de tension de surface (σ) dans un fluide au repos.	90
Tableau 6.3	Temps de détachement et volume au détachement pour différentes va- leurs de masse volumique (ρ_l) dans un fluide au repos.	91

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Exemple de procédé chimique impliquant des phases liquides et gazeuses : des bioréacteurs à algues sous la forme d'une colonne à bulles verticale utilisés pour la réduction d'émissions de CO ₂ . Par l'Université EAFIT, sous license CC BY-SA 2.0 (hyperlien).	2
Figure 2.1	Illustration des différents phases impliquées dans la respiration, tiré de [1]	4
Figure 2.2	Représentation des régimes d'écoulements pour un système constitué d'une phase liquide (en bleu) et d'une phase gazeuse (en blanc) se déplaçant horizontalement dans le sens de la flèche bleue, perpendiculairement à la direction de la gravité. De haut en bas (régime) : dispersé, "plug", stratifié, ondulé, "slug", annulaire, de fines gouttelettes. Chaque régime a une proportion de phase gazeuse plus importante et un flux gazeux plus grand que le régime précédent. Tiré de [2].	5
Figure 2.3	Représentation des sous-régimes d'écoulements d'un système à phase dispersée. De gauche à droite (écoulement de bulle) : idéalement séparé, en interaction, turbulent "churn" et aggloméré. De gauche à droite, le degré d'interaction entre les bulles est croissant. Tiré de [3].	6
Figure 2.4	Évolution de la masse volumique moyenne $\bar{\rho} = \frac{\delta m}{\delta V}$ en fonction de la taille du volume élémentaire δV . Un plateau est atteint pour une plage de valeurs de δV minorée par δV_l . La valeur de la masse volumique moyenne à ce plateau permet de définir la masse volumique du matériau. Tiré de [4] sans modification.	8
Figure 2.5	Représentation d'un système polyphasique Ω constitué de deux phases dans la représentation à deux fluides. La frontière extérieure du système est notée $\partial\Omega$ tandis que l'interface entre les fluides est notée Γ	11
Figure 2.6	Représentation d'un système polyphasique Ω constitué de deux phases dans la représentation continue. La frontière extérieure du système est notée $\partial\Omega$ tandis que le domaine interfacial est noté \mathcal{D}	13
Figure 2.7	Représentation du champ de phase pour une interface quelconque dans le modèle Volume Of Fluid (VOF). $\phi = 1$ pour le fluide 1 (en orange) et $\phi = 0$ pour le fluide 0 (en bleu)	16
Figure 2.8	Représentation de la fonction de distance signée pour une interface quelconque. La distance est positive pour le fluide 1 (en orange) et négative pour le fluide 0 (en bleu)	18

Figure 2.9	Solution stationnaire 1D des équations de Cahn-Hilliard. L'épaisseur de l'interface L_ϕ est proportionnelle à ε	22
Figure 2.10	On discrétise le domaine Ω 2D en Ω_h sur lequel on définit une fonction d'interpolation (linéaire sur le schéma) en chaque nœud du maillage. Inspiré de [5].	30
Figure 2.11	Fonctions d'interpolation 1D pour différents degrés d'interpolation. De gauche à droite, polynômes de degré 1, 2 et 3. Tiré sans modification de [6]	30
Figure 5.1	Rétrécissement d'une bulle (orange) par diffusion dans le fluide environnant (bleu), représenté à plusieurs temps et comparaison des différents états de la bulle avec l'énergie libre totale du système. L'énergie libre totale a diminué entre le début et la fin de la simulation, ce qui est acceptable du point de vue énergétique mais inacceptable du point de vue de la conservation locale de la masse.	45
Figure 5.2	Simulation du rétrécissement d'une bulle (fluide 1 en orange) par diffusion dans le fluide environnant (fluide 0 en bleu), représenté à plusieurs temps et comparaison des différents états de la bulle avec l'énergie libre totale du système. En divisant le coefficient de mobilité par 100, on ralentit considérablement la diffusion de la bulle, sans pour autant l'arrêter puisque l'énergie totale décroît.	48
Figure 5.3	Évolution de l'erreur L^2 sur ϕ en fonction du pas d'espace Δx pour différents degrés de polynômes d'interpolation dans un domaine 2D. La comparaison avec l'ordre théorique de convergence (en pointillés) montre que le schéma numérique converge aux ordres souhaités. . . .	50
Figure 5.4	Évolution de l'erreur L^2 sur ϕ en fonction du pas d'espace Δx pour différents degrés de polynômes d'interpolation dans un domaine 3D. La comparaison avec l'ordre théorique de convergence (en pointillés) montre que le schéma numérique converge aux ordres souhaités. . . .	50
Figure 5.5	Représentation du phénomène de décomposition spinodale à différents temps (unité : s), de gauche à droite : $t = 0$ s, $t = 0.1t_f$ et $t = t_f$. Les phases tendent à s'agglomérer pour former des amas de plus en plus gros afin de minimiser l'énergie d'interface.	52

Figure 5.6	Évolution des énergies du système au cours du temps. On observe une forte variation pendant les premiers pas de temps car le système est très hétérogène, leur énergie d'interface est donc élevée et les phases se séparent spontanément. Au temps long, les énergies de volume et interfaciale tendent à équilibrer leur contribution.	52
Figure 6.1	Représentation schématique du système physique de la simulation de la bulle statique	59
Figure 6.2	Comparaison du saut de pression entre les résultats numériques et la solution analytique pour le cas d'une bulle statique de rayon R	61
Figure 6.3	Représentation du champ de pression pour le cas $R = 0.4$ sur la droite $y = 0$. La variation de pression se fait continûment et sans discontinuité comme attendu d'une méthode diffuse	61
Figure 6.4	Évolution de l'erreur L^2 du champ de vitesse en fonction du pas d'espace Δx et comparaison à la pente d'ordre 2 théorique. On observe que la décroissance de l'erreur est entre les ordres 1 et 2.	62
Figure 6.5	Représentation du champ de phase à l'instant $t = 0$ et description du domaine de calcul pour le cas test de rupture de digue	62
Figure 6.6	Visualisation du maillage à proximité de l'interface. On observe trois niveaux de raffinement distincts, avec les éléments les plus petits situés à l'interface entre les fluides.	63
Figure 6.7	Évolution de l'abscisse adimensionnée du fluide 0 en fonction du temps pour trois cas : simulations numériques CHNS (en bleu et vert) pour deux niveaux de raffinement différents, simulation numérique VOF (en noir) et expérience de Martin et al. (en rouge)	64
Figure 6.8	Représentation du champ de phase à différents instants de la simulation. On constate l'étalement du fluide plus dense sous l'effet du champ de gravité. Les temps indiqués correspondent aux temps adimensionnels suivants (de gauche à droite et de haut en bas) : $\tau = 0$, $\tau = 1$, $\tau = 2$ et $\tau_f = 3.19$	64
Figure 6.9	Représentation du champ de phase à $\tau = 1.95$ (à droite) et du champ de phase comportant le filtre LIC (Line Integral Convolution) (à gauche) permettant de visualiser simplement les lignes de courant dans le domaine. On constate que l'interface est diffusée là où le champ de vitesse est perpendiculaire à l'interface.	65
Figure 6.10	Représentation du système dans sa configuration initiale et définition des dimensions du problème d'instabilité de Rayleigh-Taylor.	66

Figure 6.11	Représentation du système à plusieurs temps t correspondant aux temps t^* suivant : 0, 2.38 et 4.70. En haut, solveur CHNS, en bas solveur VOF	67
Figure 6.12	Évolution des hauteurs y de la bulle et de la pointe pour les simulations VOF, CHNS et la simulation de He et al. [7]	68
Figure 6.13	Représentation du champ de phase à $t = t_f$ pour $\sigma = 0$. On peut voir que le champ de phase présente des oscillations non-physiques qui créent des zones avec des valeurs de champ de phase aberrantes ($\phi > 1$ ou $\phi < 1$)	68
Figure 6.14	Représentation du mécanisme de montée capillaire entre les moments $t = 0$ et un temps arbitraire t_f . À cause de la condition d'angle de contact, le fluide au centre va s'élever (ou s'abaisser). On mesure alors la différence de hauteur entre le haut du ménisque et la surface du fluide à l'extérieur.	69
Figure 6.15	Évolution de la différence de hauteur ΔH au cours du temps pour différentes valeurs d'angle de contact $\alpha_c \in \{30, 50, 70, 90, 110, 130, 150\}$ degrés ($^\circ$) et comparaison à la hauteur analytique prévue par la loi de Jurin (équation (6.20)).	71
Figure 6.16	Représentation des champs de pression au temps $t = 0.5$ pour tous les angles de contact simulés. De gauche à droite : $\alpha_c = 30^\circ, 50^\circ, 70^\circ, 110^\circ, 130^\circ, 150^\circ$. On observe des zones de dépression à proximité des surfaces ayant une courbure négative ($\alpha_c < 90^\circ$) et des zones de surpression à proximité des surfaces de courbure positive ($\alpha_c > 90^\circ$)	71
Figure 6.17	Représentation du champ de phase initial pour différentes valeurs de n . De gauche à droite : $n = 2, n = 3$ et $n = 4$	73
Figure 6.18	Représentation de l'évolution de la position du point P au cours du temps (en trait plein) pour des petites oscillations et la période analytique (en pointillés) prévue par l'équation (6.24) pour $n \in \{2, 3, 4\}$ de gauche à droite.	73
Figure 6.19	Représentation de l'évolution de la position du point P au cours du temps (en trait plein) pour des grandes oscillations et la période analytique (en pointillés) prévue par l'équation (6.24) pour $n \in \{2, 3, 4\}$ de gauche à droite.	73
Figure 6.20	Représentation du champ de pression à l'intérieur de la gouttelette pour différents temps, dans le cas $n = 3$. On observe des zones de dépression là où la courbure est négative et des zones de surpression là où elle est positive.	74

Figure 6.21	Représentation des lignes de courant au temps $t = 0$ dans le domaine pour le cas $n = 3$. On retrouve les axes de symétrie du problème puisque les lignes de courant sont réparties par zones, délimitées par les axes de symétrie du problème.	75
Figure 6.22	Représentation du problème de bulle montante au temps $t = 0$ avec les dimensions et les paramètres du problème.	76
Figure 6.23	Évolution de l'ordonnée du barycentre de la bulle au cours du temps et comparaison aux valeurs expérimentales de Zahedi et al. [8] et Hysing et al. [9]	77
Figure 6.24	Évolution de la vitesse du barycentre de la bulle au cours du temps et comparaison aux valeurs expérimentales de Zahedi et al. [8] et Hysing et al. [9]	78
Figure 6.25	Contour de la bulle au temps $t = 3$ et comparaison au contour obtenu par Zahedi et al. [8]	78
Figure 6.26	Comparaison des volumes au détachement mesurés expérimentalement (en rouge) et numériquement (en noir) dans l'article de Mirsandi et al. [10]. Cette comparaison sert de validation pour leur modèle numérique. Tiré directement de [10], sous licence Creative Commons CC-BY (hyperlien).	80
Figure 6.27	Schéma d'une coupe 2D dans le plan xy du domaine Ω pour le cas de fluide au repos.	82
Figure 6.28	Schéma d'une coupe 2D dans le plan xy du domaine Ω pour le cas de fluide en mouvement.	83
Figure 6.29	Évolution de la dérivée de l'aire du contour de la bulle au cours du temps pour différents niveaux de raffinement. Le détachement de la bulle se produit au temps t_{det} qui correspond au minimum de la dérivée	86
Figure 6.30	Agrandissement de la Figure 6.29 autour du temps de détachement t_{det} . Correspond à la zone encadrée en noir dans la figure originelle.	87
Figure 6.31	Évolution du volume de la bulle au cours du temps pour différents niveaux de raffinement. Les lignes pointillées correspondent au volume de la bulle au moment de son détachement prédictes par les simulations de Mirsandi et al. On constate qu'un niveau de raffinement trop faible entraîne une perte de volume de la bulle car celle-ci diffuse dans le liquide environnant.	88
Figure 6.32	Agrandissement de la Figure 6.31 autour du temps de détachement t_{det} . Correspond à la zone encadrée en noir dans la figure originelle.	88

Figure 6.33	Représentation d'une coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour différents niveaux de raffinement. On constate que le point de détachement se rapproche d'une valeur asymptotique.	89
Figure 6.34	Coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour les résultats de Mirsandi et al. utilisant les mêmes débits et propriétés physiques. Tiré directement de [10] sous licence Creative Commons CC-BY.	89
Figure 6.35	Évolution du temps de détachement t_{det} en fonction du pas d'espace Δx , on observe que l'on tend vers une valeur limite pour des niveaux de raffinement de plus en plus élevés.	90
Figure 6.36	Évolution du volume au détachement V_{det} en fonction du pas d'espace Δx , on observe que l'on tend vers une valeur limite pour des niveaux de raffinement de plus en plus élevés.	90
Figure 6.37	Représentation d'une coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour différentes valeurs de σ sans écoulement cisaillant. On observe des déformations plus importantes pour des faibles valeurs de σ	91
Figure 6.38	Représentation d'une coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour différentes valeurs de ρ_l sans écoulement cisaillant.	92
Figure 6.39	Représentation du système physique correspondant au cas $\sigma = 0.25\sigma_w$ sans écoulement cisaillant à différents instants t : $t = 0.019289$ (a), $t = 0.023506$ (b), $t = 0.024688$ (c). On voit que l'intensité du champ de vitesse augmente lorsqu'approche le moment du détachement car la section de passage du gaz devient de plus en plus étroite ce qui entraîne la formation du jet. Puisque σ est peu élevé, la surface de la bulle se déforme facilement sous l'action du jet.	93
Figure 6.40	Comparaison des temps de détachement pour différents taux de cisaillage entre les résultats du modèle CHNS implémenté dans Lethé (en noir) et les résultats du modèle LFRM implémenté par Mirsandi et al. (en rouge) Les propriétés du fluide sont celles de l'eau : $\rho_l = \rho_w = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ et $\sigma = \sigma_w = 0.073 \text{ N.m}^{-1}$	94

Figure 6.41	Comparaison des volumes au détachement pour différents taux de cisaillement entre les résultats du modèle CHNS implémenté dans Lethe (en noir) et les résultats du modèle LFRM implémenté par Mirsandi et al. (en rouge) Les propriétés du fluide sont celles de l'eau : $\rho_l = \rho_w = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ et $\sigma = \sigma_w = 0.073 \text{ N.m}^{-1}$	95
Figure 6.42	Représentation d'une coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour différents taux de cisaillement S . Un taux de cisaillement élevé signifie une vitesse élevée du fluide, ce qui a tendance à emmener la bulle dans son mouvement. D'où l'augmentation d'inclinaison observée avec l'augmentation de S . Les propriétés du fluide sont celles de l'eau : $\rho_l = \rho_w = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ et $\sigma = \sigma_w = 0.073 \text{ N.m}^{-1}$	96
Figure 6.43	Comparaison des résultats de temps de détachement (a) et volumes de détachement (b) Mirsandi et al. [10] (sous license Creative Commons CC-BY) utilisant un débit d'air $Q = 1.67 \times 10^2 \text{ mm}^3\text{s}^{-1}$ (à gauche) aux résultats du solveur CHNS de Lethe (c) et (d) qui utilise un débit d'air $Q = 5.00 \times 10^2 \text{ mm}^3\text{s}^{-1}$ (à droite) pour différentes valeurs de ρ_l . Certains résultats ($S = 0 \text{ s}^{-1}$ et $S = 100 \text{ s}^{-1}$) sont manquants par manque de temps.	97
Figure 6.44	Comparaison des résultats de temps de détachement (a) et volumes de détachement (b) Mirsandi et al. [10] (sous license Creative Commons CC-BY) qui utilise un débit d'air $Q = 1.67 \times 10^2 \text{ mm}^3\text{s}^{-1}$ (à gauche) aux résultats du solveur CHNS de Lethe (c) et (d) qui utilise un débit d'air $Q = 5.00 \times 10^2 \text{ mm}^3\text{s}^{-1}$ (à droite) pour différentes valeurs de σ . Certains résultats ($S = 0 \text{ s}^{-1}$) sont manquants par manque de temps.	98
Figure 6.45	Coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour $\rho_l = 0.2\rho_w$ (a) et $\rho_l = 2.5\rho_w$ (b)	99
Figure 6.46	Coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour $\sigma = 0.2\sigma_w$ (a) et $\sigma = 2.5\sigma_w$ (b)	100

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Abréviations

CFD	Computational Fluid Dynamics
DEM	Discrete Element Method
FEM	Finite Element Method
FDM	Finite Difference Method
FVM	Finite Volume Method
MMS	Method of Manufactured Solution
MSM	Méthode des Solutions Manufacturées
CSF	Continuous Surface Force
CHNS	Cahn-Hilliard-Navier-Stokes
EDP	Équation aux Dérivées Partielles
LBB	Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi
BDF	Backward Differentiation Formula
DoFs	Degrees of Freedom
GMRES	Generalized Minimal RESidual method
ILU	Incomplete Lower Upper
VOF	Volume Of Fluid
LS	Level Set
SLIC	Simple Linear Interface Calculation
PLIC	Piecewise Linear Interface Calculation
SUPG	Streamline-Upwind Petrov-Galerkin
PSPG	Pressure-Stabilizing Petrov-Galerkin
CFL	Courant-Friedrichs-Lowy
LFRM	Local Front Reconstruction Method
MPI	Message Passing Interface

LISTE DES VARIABLES, SYMBOLES ET NOTATIONS

Variables

ρ	Massé volumique ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)
$\bar{\rho}$	Massé volumique moyenne ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)
δV	Volume élémentaire (m^3)
δA	Surface élémentaire (m^2)
δf	Force élémentaire (N)
\mathbf{n}	Normale sortante à une surface (-)
N_A	Constante d'Avogadro (mol^{-1})
$\underline{\underline{T}}$	Tenseur des contraintes (Pa)
$\underline{\underline{\tau}}$	Tenseur des contraintes visqueuses (Pa)
$\underline{\underline{I}}$	Matrice identité
p	Pression du fluide (Pa)
\mathbf{u}	Vitesse du fluide ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)
μ	Viscosité dynamique (Pa.s)
μ_V	Viscosité en volume (Pa.s)
\mathbf{f}_V	Force volumique ($\text{N} \cdot \text{m}^{-3}$)
\mathbf{g}	Accélération gravitationnelle ($\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$)
Ω	Domaine
$\partial\Omega$	Frontière extérieure du domaine
Ω_i	Domaine correspondant au fluide i
Γ	Frontière intérieure à Ω entre deux fluides différents
\mathbf{w}	Vitesse de l'interface ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)
σ	Coefficient de tension de surface ($\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$)
ϕ	Champ de phase
\mathcal{D}	Domaine interfacial
$\underline{\underline{T}}_K$	Tenseur des contraintes de Korteweg
δ_Γ	Fonction delta de Dirac sur Γ
\mathbf{f}_σ	Force de tension de surface (N)
κ	Courbure (m^{-1})
ϵ	Longueur caractéristique d'étalement de l'échelon de Heaviside (modèle Level Set)
τ	Pseudo-temps de redistanciation (modèle Level Set) (m^{-1})
\mathcal{E}	Fonctionnelle d'énergie libre de Helmholtz (J)

Ψ	Densité d'énergie libre de Helmholtz ($\text{J} \cdot \text{m}^{-3}$)
λ	Énergie de mélange ($\text{J} \cdot \text{m}^{-1}$)
F	Densité d'énergie libre en volume (m^{-2})
f	Dérivée par rapport à ϕ de F (m^{-2})
η	Potentiel chimique ($\text{J} \cdot \text{m}^{-3}$)
ε	Épaisseur d'interface caractéristique (m)
$\bar{\phi}$	Moyenne de ϕ sur le domaine (m^{-3})
\mathbf{J}	Flux diffusif ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)
M	Fonction de mobilité ($\text{m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$)
D	Coefficient de mobilité ($\text{m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$)
L_ϕ	Longueur caractéristique de transition d'une phase à l'autre (m)
$\underline{\underline{\mathbf{T}}}_\sigma$	Tenseur de contrainte capillaire (Pa)
$\tilde{\mathbf{J}}$	Flux relatif diffusif ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$)
Ω_h	Domaine discréteisé
γ_i	i-ème coefficient pour un schéma BDF arbitraire
\mathcal{J}	Matrice jacobienne
$\Gamma_{x,n}$	Frontière de condition de Neumann sur la variable x
n_ϕ	Fonction de condition de Neumann sur ϕ
$\Gamma_{x,d}$	Frontières de condition de Dirichlet sur la variable x
α_c	Angle de contact
g	Fonction associée à la condition de Dirichlet sur ϕ
h	Fonction associée à la condition de Dirichlet sur η
α	Fonction test associée à ϕ
β	Fonction test associée à η
h	Taille caractéristique de cellule d'un maillage (m)
V	Volume du domaine (m^3)
R_0, r_0	Rayons caractéristiques (m)
Δr	Variation caractéristique de rayon (m)
Δx	Taille caractéristique de cellule dans la direction d'un axe du problème (m)
t_f	Temps final de simulation (s)
R	Rayon (m)
t^*	Temps adimensionnel
ν	Viscosité cinématique ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)
Δt	Pas de temps (s)
Δt_σ	Pas de temps capillaire (s)

ρ_w	Masse volumique de l'eau ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)
μ_w	Viscosité dynamique de l'eau (Pa.s)
σ_w	Coefficient de tension de surface eau-air ($\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$)
S	Taux de cisaillement (s^{-1})
t_{det}	Temps de détachement (s)
V_{det}	Volume au détachement (m^3)

Nombres adimensionnels

Cn Nombre de Cahn

Symboles

x	Tenseur d'ordre 0 (scalaire)
\mathbf{x}	Tenseur d'ordre 1 (vecteur)
$ \mathbf{x} $	Norme du vecteur \mathbf{x} , tenseur d'ordre 0
$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$	Produit scalaire entre \mathbf{x} et \mathbf{y} , tenseur d'ordre 0
$\mathbf{x} \wedge \mathbf{y}$	Produit vectoriel entre \mathbf{x} et \mathbf{y} , tenseur d'ordre 1
$\underline{\mathbf{X}}$	Tenseur d'ordre 2 (matrice)
∇x	Gradient de x , tenseur d'ordre 1
$\nabla_\Gamma x$	Gradient de x en suivant la courbe Γ , tenseur d'ordre 1
$\nabla \mathbf{x}$	Gradient de \mathbf{x} , tenseur d'ordre 2
$\nabla \cdot \mathbf{x}$	Divergence de \mathbf{x} , tenseur d'ordre 0
$\nabla \cdot \underline{\mathbf{X}}$	Divergence de $\underline{\mathbf{X}}$, tenseur d'ordre 1
$\mathbf{x} \otimes \mathbf{y}$	Produit dyadique entre \mathbf{x} (ordre 1) et \mathbf{y} (ordre 1), tenseur d'ordre 2
$\underline{\mathbf{X}} : \underline{\mathbf{Y}} = \sum_{i,j} X_{i,j} Y_{j,i}$	Double contraction de $\underline{\mathbf{X}}$ (ordre 2) et $\underline{\mathbf{Y}}$ (ordre 2), tenseur d'ordre 0
$\underline{\mathbf{X}}^T$	Matrice transposée de $\underline{\mathbf{X}}$
$\delta_{i,j}$	Symbol de Kronecker
$\llbracket f \rrbracket = f_1 - f_0$	Saut de valeur de la fonction f entre le fluide 1 et le fluide 0
$\frac{\delta f}{\delta x}$	Dérivée variationnelle de f par rapport à x .

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Avez-vous déjà essayé de mélanger de l'huile et du vinaigre pour assaisonner votre salade ? Vous voilà devant une étrange mixture, les deux composants refusent de se mélanger et les gouttes d'huile forment comme des îlots dans la mixture. Ajoutez de la moutarde et vous verrez la phase grasse être plus enclue à se mêler à la phase vinaigrée. Bravo ! Sans le savoir, vous avez abaissé l'énergie de surface de l'interface huile/vinaigre, ce qui a rendu le mélange plus favorable énergétiquement parlant. Bienvenue dans les rangs des mécaniciens des fluides, option écoulements polyphasiques.

Donnons tout d'abord des définitions plus claires. Une **phase** (ou **phase thermodynamique**) est une région d'un système où les grandeurs intensives (densité, pression ou même couleur) sont continues. Cette définition très générale permet d'inclure les phases usuelles : les différents états de l'eau par exemple, autant que des mélanges plus complexes, comme notre vinaigrette. Naturellement, un écoulement polyphasique est un écoulement de fluides présentant plusieurs phases qui peuvent être liquides, solides ou gazeuses.

Outre l'exemple de la vie quotidienne que l'on vient d'évoquer, les écoulements polyphasiques sont présents dans de très nombreux domaines techniques : la santé (échanges liquide-gaz dans le système respiratoire, écoulements solide-liquide dans les vaisseaux sanguins, mélanges de liquides non-miscibles, etc.) [11], l'industrie chimique (réacteurs contenant des espèces liquides et des catalyseurs solides, colonnes à bulles pour le mélange (Figure 1.1)) [12] [13] ou encore les sciences de l'environnement et les phénomènes naturels tels que la pluie, la grêle, la neige, etc. [14]. Il est fondamental de comprendre les mécanismes qui régissent ces phénomènes afin de mieux les contrôler et éventuellement de les utiliser à notre avantage. Les scientifiques établissent ainsi des modèles pour décrire le comportement de ces écoulements, et confrontent les résultats qui dérivent des équations au réel afin de valider (et si besoin affiner) leur modèle.

Dans cette démarche, la simulation numérique peut être d'une grande aide pour tester les modèles et prévoir la dynamique d'évolution de systèmes polyphasiques. Ainsi peut-on s'en servir pour vérifier la cohérence des modèles d'une part, d'autre part on peut simuler très précisément certains phénomènes physiques pour mieux en comprendre les subtilités. De nombreuses méthodes existent pour simuler des écoulements polyphasiques. On a choisi de s'intéresser plus précisément aux écoulements liquide-gaz, qui sont caractérisés par des mécanismes tels que la coalescence, le mouillage ou la rupture d'interface, ce qui a mené au choix d'un modèle d'interface diffuse, très adapté pour gérer ces mécanismes, mais encore



FIGURE 1.1 Exemple de procédé chimique impliquant des phases liquides et gazeuses : des bioréacteurs à algues sous la forme d'une colonne à bulles verticale utilisés pour la réduction d'émissions de CO₂. Par l'Université EAFIT, sous license CC BY-SA 2.0 ([hyperlien](#)).

peu utilisé dans la littérature scientifique par rapport aux modèles à interface nette.

L'objectif de ce mémoire est donc le développement, l'implémentation et l'étalonnage d'un modèle à interface diffuse pour simuler des écoulements polyphasiques. Pour ce faire, les équations de Cahn-Hilliard couplées aux équations de Navier-Stokes ont été choisies comme modèle puis implantées dans le logiciel de mécanique des fluides numérique (en anglais Computational Fluid Dynamics (CFD)) en libre accès Lethé [15]. Les performances du modèle a été faite par la simulation de nombreux cas tests. Ceci a permis de mieux comprendre le paramétrage du modèle et de ses constantes afin de l'appliquer à un cas plus complexe tel que présenté à la fin du mémoire.

La structure est la suivante : d'abord, la revue de littérature où l'on couvre les éléments théoriques de mécaniques des fluides polyphasique puis on présente les modèles de simulation qui découlent des différents paradigmes de la théorie. On traite ensuite les questions de résolution numérique. Puis, après la présentation des objectifs et de la méthodologie du mémoire, on présente les résultats obtenus qui seront l'objet d'une discussion. Finalement, on synthétisera le travail du mémoire dans la conclusion et on présentera les limites des travaux effectués ainsi que des recommandations et idées de travaux futurs.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

Tout l'objet de ce mémoire porte sur les écoulements polyphasiques, notamment ceux incluant des phases liquides et gazeuses, par l'emploi de méthodes numériques. Naturellement, cette revue de littérature abordera d'abord les types d'écoulements polyphasiques existant pour définir exactement les problèmes qui seront étudiés dans ce travail. Ensuite, des notions théoriques de mécanique des fluides diphasiques seront rappelées, qui permettront de comprendre les différents phénomènes en jeu dans les écoulements polyphasiques et d'introduire la notion de champ de phase. Seront ensuite passés en revue les différents modèles d'évolution des champs de phase dans la section suivante, séparée de la première car elle se situe entre la théorie physique et la modélisation. Une partie sur la résolution numérique conclura la revue, en introduisant le cadre théorique et algorithmique de la méthode des éléments finis employée dans ce travail.

2.1 Généralités sur les écoulements polyphasiques

Il existe une très grande diversité d'écoulements polyphasiques, chacun comportant leur complexité propre. Il est irréaliste de penser qu'une étude seule permettrait de tous les décrire exhaustivement, aussi le nombre de cas étudiés sera volontairement restreint pour que notre étude soit la plus approfondie possible.

2.1.1 Définitions et types de problèmes

On appelle phase thermodynamique (appelé plus simplement phase dans la suite) une région de l'espace où les propriétés physiques du milieu sont uniformes [16]. Les propriétés sont intrinsèques à la phase, il peut s'agir de la masse volumique, la chaleur spécifique, l'indice de réfraction, ou la composition chimique.

Cette définition générale permet de décrire des systèmes comportant des états de la matière différents d'un même composé chimique, par exemple des glaçons dans un verre d'eau, mais aussi des espèces dans le même état de la matière mais se mélangeant pas, de l'huile dans de l'eau par exemple. Il est aussi possible d'avoir deux espèces différentes dans des états de la matière différents, comme une bulle d'air dans de l'eau. Ou encore un système d'une seule phase qui subit une transition de phase à cause d'un apport d'énergie (positif ou négatif) depuis l'extérieur : de l'eau qui bout dans une casserole.

La mécanique des fluides polyphasique s'intéresse à la description des écoulements présen-

tant plusieurs phases. Elle trouve son application dans de très nombreux domaines. Dans le domaine médical, la respiration est un problème typiquement polyphasique qui implique les trois états de la matière : on respire de l'air (gazeux) qui emporte des particules microscopiques (solide) jusque dans nos poumons où se fait un échange d'oxygène entre le sang (liquide) dans les alvéoles pulmonaires (voir Figure 2.1).

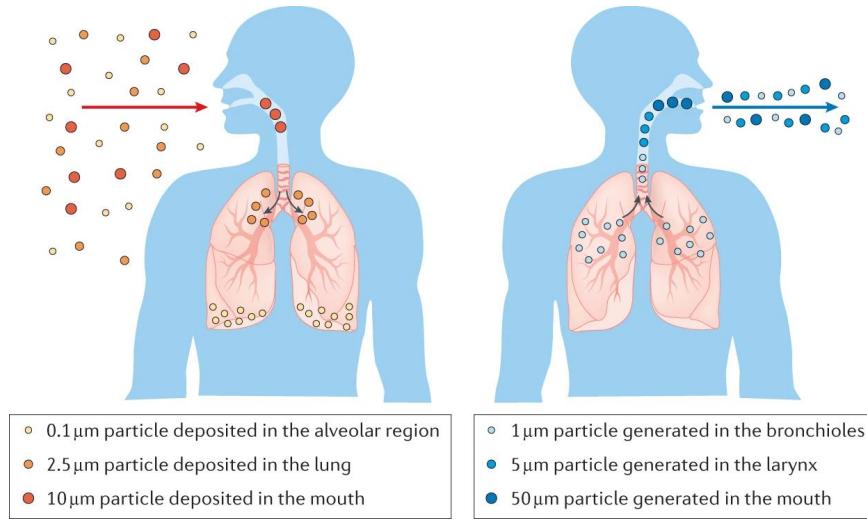


FIGURE 2.1 Illustration des différents phases impliquées dans la respiration, tiré de [1]

2.1.2 Écoulements liquide-gaz

Dans ce travail, on s'intéresse plus précisément aux écoulements impliquant des phases gazeuses en présence de phases liquides. Là-encore, il existe une myriade de possibilités en fonction des proportions relatives de chaque phase. La Figure 2.2 donne un aperçu des écoulements possibles.

Parmi les régimes présentés, on mettra l'accent sur les régimes à phase dispersée. Ils sont caractérisés par une faible proportion de phase gazeuse par rapport à la phase liquide et une vitesse de la phase gazeuse "faible", au sens où le flux de phase gazeuse injecté n'influence pas l'écoulement autrement qu'en gonflant des bulles d'air [3]. La phase liquide est continue et la phase gazeuse prend la forme de bulles présentant des frontières complexes qui évoluent dans le temps. Les bulles peuvent interagir avec leur environnement : deux bulles peuvent fusionner (coalescence), une bulle peut se séparer en deux bulles (rupture), une bulle peut interagir avec une frontière solide et présenter un angle de contact. Ces phénomènes peuvent

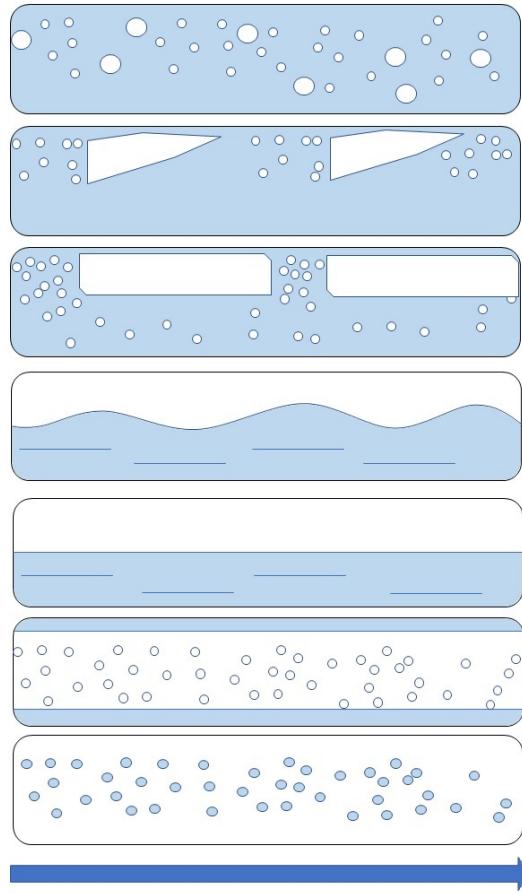


FIGURE 2.2 Représentation des régimes d'écoulements pour un système constitué d'une phase liquide (en bleu) et d'une phase gazeuse (en blanc) se déplaçant horizontalement dans le sens de la flèche bleue, perpendiculairement à la direction de la gravité. De haut en bas (régime) : dispersé, "plug", stratifié, ondulé, "slug", annulaire, de fines gouttelettes. Chaque régime a une proportion de phase gazeuse plus importante et un flux gazeux plus grand que le régime précédent. Tiré de [2].

se produire en même temps, ce qui entraîne des changements topologiques complexes.

Les écoulements à phase dispersée sont classés en sous-catégories selon la distinction faite par Kataoka et al. [3]. Cette distinction est basée sur le degré d'interaction entre les bulles présentes dans l'écoulement comme en témoigne la Figure 2.3.

On se concentrera sur des systèmes présentant un régime d'écoulement idéalement séparé où l'on étudiera la séparation de bulles ainsi que l'interaction avec des frontières solides.

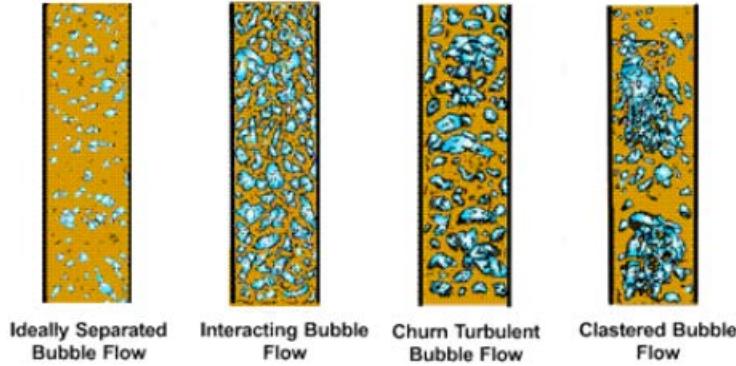


FIGURE 2.3 Représentation des sous-régimes d'écoulements d'un système à phase dispersée. De gauche à droite (écoulement de bulle) : idéalement séparé, en interaction, turbulent "churn" et aggloméré. De gauche à droite, le degré d'interaction entre les bulles est croissant. Tiré de [3].

Ces jalons préliminaires ayant été posés, on peut maintenant s'attaquer aux aspects théoriques qui permettent de décrire les écoulements polyphasiques liquide-gazeux à phase dispersée, en régime idéalement séparé.

2.2 Théorie des écoulements polyphasiques

La section suivante donne les éléments théoriques nécessaires à la compréhension des écoulements polyphasiques. Dans cette section, on rappelle des notions de base de mécanique des fluides auxquelles seront ajoutées des notions relatives aux écoulements polyphasiques. Aussi même si l'exposé qui suit est très général, pensez que le champ d'application est, lui, très restreint, puisqu'on se s'intéresse qu'à un seul type d'écoulement polyphasique.

Les lecteurs désireux de revoir plus en profondeur la mécanique des milieux continus et plus particulièrement la mécanique des fluides pourront se référer à l'ouvrage de S. Candel [4] (chapitres I à VI) et le chapitre II de l'ouvrage de J. N. Reddy [17].

2.2.1 Mécanique des milieux continus

Il est connu depuis l'Antiquité et les atomistes que le monde environnant est constitué de particules microscopiques, les atomes, qui peuvent à leur tour être décomposés en particules élémentaires. Aussi, pour comprendre et prédire parfaitement l'évolution d'un système physique, il suffirait de connaître le comportement de chacune des particules élémentaires le constituant. Prenons un cas simple : une goutte d'eau pure. Connaissant la masse molaire de

l'eau ($M_{\text{eau}} = 18.01528 \text{ g.mol}^{-1}$) et en estimant la masse de la goutte à $m_{\text{goutte}} = 0.05 \text{ g}$, on peut en déduire le nombre de molécules d'eau (N_{goutte} , sans dimension) du système :

$$N_{\text{goutte}} = N_A \frac{m_{\text{goutte}}}{M_{\text{eau}}} = 1.67 \times 10^{18} \quad (2.1)$$

Avec N_A la constante d'Avogadro ($N_A = 6.022 \times 10^{22} \text{ mol}^{-1}$). On se rend compte de la tâche colossale que serait le calcul des trajectoires de toutes ces molécules d'eau, et ce pour décrire une simple goutte ! Pour pallier cette difficulté, les mécaniciens des fluides ont introduit le concept de milieu continu. Plutôt que de regarder la matière comme des particules microscopiques qui agissent de manière aléatoire, il est plus pertinent de considérer une échelle mésoscopique où l'on regarde des amas de molécules ayant un mouvement d'ensemble. Ce mouvement d'ensemble s'interprète comme la résultante à grande échelle des mouvements chaotiques de la plus petite échelle. Cette approximation permet d'utiliser les grandeurs usuelles pour décrire le système : masse volumique, vitesse, force...

Illustrons ce concept en donnant une définition de la masse volumique, le raisonnement présenté est inspiré de [4]. On considère un système contenant un fluide quelconque contenu dans un volume V . On considère aussi un point P de ce volume autour duquel on prendrait un volume élémentaire δV et appelons δm la masse contenue dans δV . Définissons la masse volumique moyenne $\bar{\rho} = \frac{\delta m}{\delta V}$. Pour des valeurs *grandes* de δV , le fluide peut présenter des hétérogénéités qui rendent la masse volumique moyenne fluctuante. On pense par exemple à de l'air où se propage une onde sonore et qui présente des zones de dépression et de compression, donc des zones de petite masse volumique et grande masse volumique. À l'inverse, si l'on considère un volume élémentaire trop petit, alors la masse volumique moyenne peut changer dramatiquement à cause des mouvements chaotiques des molécules à cette échelle. Voir la Figure 2.4 pour une représentation plus imagée de ce raisonnement. Pour un volume élémentaire intermédiaire, la masse volumique moyenne est à un plateau : le fluide est pratiquement homogène. On se sert de cette valeur plateau pour définir la masse volumique du fluide, notée ρ , au point P . En raisonnant pareillement, on peut définir la vitesse, la force ou la contrainte en un point P de l'espace, c'est le paradigme dans lequel on se place dans toute cette étude.

2.2.2 Mouvement d'un fluide : approches Eulérienne et Lagrangienne

Lorsque l'on regarde un fluide en mouvement, on s'intéresse à des grandeurs telles que la vitesse de l'écoulement \mathbf{u} , la masse volumique ρ ou la pression p . Prenons une fonction quelconque, notée ϕ , qui pourrait correspondre à l'une des grandeurs citée précédemment.

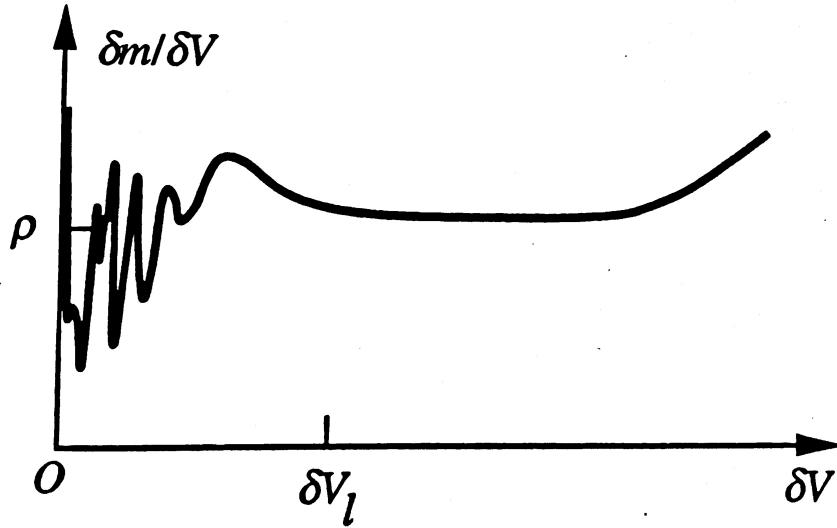


FIGURE 2.4 Évolution de la masse volumique moyenne $\bar{\rho} = \frac{\delta m}{\delta V}$ en fonction de la taille du volume élémentaire δV . Un plateau est atteint pour une plage de valeurs de δV minorée par δV_l . La valeur de la masse volumique moyenne à ce plateau permet de définir la masse volumique du matériau. Tiré de [4] sans modification.

Mais à quoi s'intéresse-t-on exactement ? S'agit-il de la fonction $\phi(\mathbf{x}, t)$ à un instant t et en un point de l'espace \mathbf{x} , choisi sur une grille arbitraire appliquée au système ? Ou s'agit-il de la fonction $\phi(\mathbf{X}, t)$ d'une particule définie par sa position initiale \mathbf{X} et à un instant t ? La réponse à cette question est exactement ce qui sépare les descriptions **Eulérienne** et **Lagrangienne** du mouvement [17].

Dans l'approche Lagrangienne, on considère à l'instant $t = 0$ que le milieu est divisé en particules de matière ayant chacune une position initiale notée \mathbf{X} . Puis, au fur et à mesure que le système évolue, on suit l'évolution des particules au cours du temps en suivant leur mouvement. Cette dernière précision appuie le fait que le référentiel est lié au mouvement de la particule. L'approche Eulérienne elle, s'intéresse à l'évolution de quantités d'intérêt de l'écoulement au cours du temps en des points \mathbf{x} de l'espace arbitrairement définis. Dans ce cas-là, le référentiel est fixe. Dans tout ce mémoire, on se placera dans le formalisme Eulérien qui permettra de formuler les équations dans leur forme usuelle.

2.2.3 Contraintes dans un fluide

La notion de contrainte est essentielle à la compréhension de la mécanique des milieux continus, dont la mécanique des fluides, et *a fortiori* la mécanique des fluides polyphasique, seront des cas particuliers. Pour un fluide en mouvement, les contraintes apparaissent sous la forme

du **tenseur des contraintes**, noté $\underline{\underline{T}}$. On décompose usuellement $\underline{\underline{T}}$ en deux contributions : les contraintes normales correspondant à la pression et les contraintes visqueuses liées aux mouvements relatifs à l'intérieur du fluide. Plus formellement, on a donc :

$$\underline{\underline{T}} = \underline{\underline{\tau}} - p\underline{\underline{I}} \quad (2.2)$$

Où $\underline{\underline{\tau}}$ est appelé le **tenseur des contraintes visqueuses** et $\underline{\underline{I}}$ est la matrice identité. On décompose $\underline{\underline{\tau}}$, que l'on écrit en notation indicelle, comme suit :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\mu_V - \frac{2}{3}\mu \right) \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (2.3)$$

Ceci permet d'introduire la **viscosité dynamique** μ , dont l'unité est le Pascal seconde (Pa.s) et la **viscosité en volume**, μ_V , de même unité. Cette dernière est très fréquemment négligée, comme ce sera le cas dans cette étude. Aussi, le tenseur des contraintes visqueuse se réduit à :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (2.4)$$

2.2.4 Équations de Navier-Stokes

Après les milieux continus, on s'attaque maintenant au cœur de la mécanique des fluides en présentant les équations fondamentales régissant l'évolution d'un écoulement fluide : les **équations de Navier-Stokes**. Dans sa forme la plus générale, on s'intéresse à l'évolution de deux champs : la masse volumique du fluide dans l'écoulement, un champ scalaire noté ρ et la vitesse, un champ vectoriel noté \mathbf{u} . Ces grandeurs dépendent du temps et de l'espace, donc $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ et $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. Un bilan de matière (respectivement de quantité de mouvement) sur un volume arbitraire permettent d'écrire :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.5)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} + \rho \mathbf{f}_V \quad (2.6)$$

La première équation est appelée **équation de continuité** et traduit la conservation de la masse au sein du système. La deuxième équation traduit la conservation de la quantité de mouvement et se comprend comme suit. Au sein d'un écoulement fluide, la quantité de mouvement est transmise de trois manières :

- Par transport de matière : $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$. Du fluide en mouvement amène avec lui de la quantité de mouvement.
- Par les contraintes de pression au sein du fluide : $-\nabla p$.
- Par les contraintes fluides visqueuses : $\nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}$. Elles sont dues au mouvement relatif des couches de fluides.
- Par des forces volumiques : $\rho \mathbf{f}_V$. Des effets extérieurs sont des sources de quantité de mouvement, comme l'accélération gravitationnelle \mathbf{g} par exemple.

Dans de nombreux types d'écoulements, on néglige les variations de la masse volumique. Ainsi, elle ne varie plus dans le temps ni dans l'espace, ce qui permet de simplifier l'équation de continuité à :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.7)$$

On fera référence à cette équation comme la contrainte d'incompressibilité dans la suite. À noter que le caractère incompressible se rapporte plus au type d'écoulement considéré qu'au fluide qui constitue l'écoulement.

Cette hypothèse permet d'écrire une forme simplifiée de (2.6). On développe le tenseur des contraintes et on sépare les contributions des forces de pression des contributions visqueuses. On obtient finalement la forme suivante des équations de conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) + \rho \mathbf{f}_V \quad (2.8)$$

2.3 Équations de Navier-Stokes polyphasiques

Différents points de vue existent pour décrire les systèmes présentant plusieurs phases : le modèle à deux fluides et le modèle continu. Ces modèles diffèrent dans la manière dont sont écrites les équations de conservation de la quantité de mouvement et le traitement de la frontière entre les phases. Même si l'appellation est impropre, le modèle à deux fluides est proche du formalisme Lagrangien tandis que le modèle continu est proche du formalisme Eulérien.

La présence de phases distinctes en interaction ajoute une couche de complexité à l'analyse du problème. Premièrement, l'interface entre les fluides rajoute une force, appelée **tension de surface**, dont l'échelle est donnée par le coefficient de tension de surface que l'on note σ . On notera que la tension de surface peut être *a priori* une fonction de grandeurs physiques du système, telle que la température. Ensuite, les phases peuvent diffuser l'une dans l'autre, ce qui transporte de la masse et de la quantité de mouvement entre les deux fluides.

2.3.1 Modèle à deux fluides

Une manière simple d'étendre les résultats de la partie précédente à des systèmes polyphasiques est de décomposer le système en autant de sous-systèmes qu'il y a de phases en présence. Ces sous-systèmes sont monophasiques par construction et on peut les décrire avec les équations de Navier-Stokes usuelles.

Cependant, on doit prendre en compte l'interaction entre les phases et intégrer dans le système d'équations que les propriétés physiques peuvent varier dramatiquement d'une phase à l'autre. Prenons un exemple simple : une bulle d'air dans de l'eau. Dans ce cas, la viscosité dynamique est multipliée par un facteur 100 et la masse volumique par un facteur 1000 en passant de l'air à l'eau. Les contraintes liées à la tension de surface agissent à la surface de la bulle et lui donnent sa forme sphérique.

Il est donc nécessaire d'inclure dans notre modèles des conditions qui traduisent ces discontinuité : c'est ce qu'on appelle des conditions de saut. Elles portent sur des champs tels que la vitesse, la pression, la contrainte, etc.

Soit Ω un système physique illustré à la Figure 2.5, de frontière $\partial\Omega$ constitué de deux fluides d'indices 0 et 1. On considère deux sous-systèmes correspondant chacun à un fluide, notés Ω_0 et Ω_1 . Ceci implique l'existence d'un frontière intérieure à Ω , que l'on notera Γ , correspondant à l'interface entre les deux fluides, qui se déplace à une vitesse \mathbf{w} . On oriente arbitrairement le vecteur normal unitaire \mathbf{n} à l'interface du fluide 0 vers le fluide 1. Les champs et propriétés physiques relatifs au sous-système Ω_i porteront naturellement l'indice i . Dans la suite ρ_i , \mathbf{u}_i , \mathbf{T}_i seront notamment utilisés.

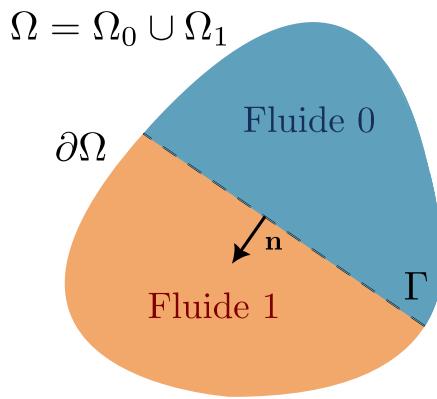


FIGURE 2.5 Représentation d'un système polyphasique Ω constitué de deux phases dans la représentation à deux fluides. La frontière extérieure du système est notée $\partial\Omega$ tandis que l'interface entre les fluides est notée Γ

Conservation de la masse La première condition de saut concerne la conservation de la masse. Le flux de matière à travers Γ doit être le même pour les deux fluides. Formellement, cette condition s'écrit comme suit :

$$[\![\rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}]\!] = \rho_1(\mathbf{u}_1 - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n} - \rho_0(\mathbf{u}_0 - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.9)$$

où $[\![f]\!] = f_1 - f_0$ désigne le saut de valeur de la fonction f entre le fluide 1 et le fluide 0.

Conservation de la quantité de mouvement La deuxième condition de saut traduit la conservation de quantité de mouvement à l'interface et s'écrit :

$$[\![\mathbf{T}]\!] \cdot \mathbf{n} + \nabla_{\Gamma}\sigma - 2\sigma\kappa\mathbf{n} - [\![\mathbf{u}\rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}]\!] = 0 \quad (2.10)$$

où $\nabla_{\Gamma}\sigma$ est le gradient de la tension de surface le long de l'interface. Ce terme représente l'effet de Marangoni [18]. On considère dans toute cette étude que la tension de surface est une constante, donc $\nabla_{\Gamma}\sigma = 0$. κ désigne la courbure de l'interface. En prenant le produit scalaire de (2.10) avec \mathbf{n} , on obtient :

$$\mathbf{n} \cdot [\![\mathbf{T}]\!] \cdot \mathbf{n} - [\![\mathbf{u}\rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}]\!] \cdot \mathbf{n} = 2\sigma\kappa\mathbf{n} \quad (2.11)$$

Cette condition de saut traduit le saut de contraintes normales à l'interface. Ce saut ($\mathbf{n} \cdot [\![\mathbf{T}]\!] \cdot \mathbf{n}$) est dû à un possible flux massique à l'interface (le terme $[\![\mathbf{u}\rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}]\!] \cdot \mathbf{n}$) d'une part. D'autre part, l'interface a une certaine rigidité qui s'oppose à sa déformation qui apparaît dans le terme $2\sigma\kappa\mathbf{n}$.

2.3.2 Modèle continu

Aux antipodes du modèle à deux fluides se trouve le modèle continu. Ici, on ne considère qu'un seul fluide dont les propriétés physiques varient spatialement, chaque phase est repérée par un **champ de phase** qui varie continûment, et que l'on note usuellement ϕ . Ceci permet de considérer une interface d'épaisseur non-nulle. On considère les mêmes notations que précédemment, en se plaçant cette fois dans le paradigme continu. Alors l'interface infiniment fine qu'on avait jusque-là n'existe plus, elle est remplacée par un domaine interfacial \mathcal{D} où l'on transitionne d'une phase à l'autre rapidement mais continûment, comme on peut le voir sur la Figure 2.6.

Comment dès lors écrire les équations de Navier-Stokes si les propriétés physiques ne sont plus des constantes du problème mais varient spatialement ? On se base sur les équations

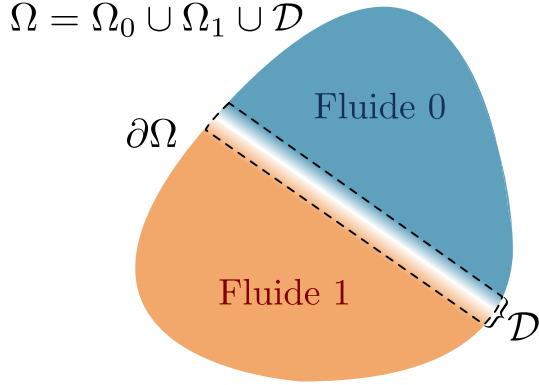


FIGURE 2.6 Représentation d'un système polyphasique Ω constitué de deux phases dans la représentation continue. La frontière extérieure du système est notée $\partial\Omega$ tandis que le domaine interfacial est noté \mathcal{D}

de Navier-Stokes usuelles (équation (2.8)) et on y introduit le champ de phase (ϕ) qui varie continûment entre deux valeurs limites (-1 et 1 par exemple) et on associe chaque fluide à l'un de ces extrema. Pour suivre l'interface, on va donc regarder une isovaleur intermédiaire pour le champ de phase, par exemple 0 . Puisque l'interface n'est plus infiniment mince, il faut aussi trouver une manière d'introduire des forces ou contraintes à cette interface même pour prendre en compte les effets de tension superficielles. Historiquement, l'idée proposée par Korteweg en 1901 [19] est de distribuer la tension à la surface de l'interface (telle que définies par les conditions de saut de l'équation (2.10)) dans le domaine interfacial par l'introduction de contraintes supplémentaires [20]. L'expression proposée par Korteweg est :

$$\underline{\underline{T}}_K = \left(\rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{2} |\nabla \rho|^2 \right) \underline{\underline{I}} - \nabla \rho \otimes \nabla \rho \quad (2.12)$$

On voit que chaque terme de cette expression est proportionnel au gradient de la masse volumique (ou sa norme). Ceci montre que le tenseur ne s'exprime que dans des zones où la masse volumique varie intensément, ce qui correspond bien au domaine interfacial. En outre, le premier terme est purement diagonal et traduit les contraintes normales à l'interface tandis que le deuxième a des termes extra-diagonaux, responsables des effets tangentiels. Ici, le champ de masse volumique joue le rôle de champ de phase.

Plus récemment, Brackbill [21] a proposé d'inclure les effets de tension de surface dans un terme de force surfacique dans son modèle de *Continuous Surface Force*. L'expression proposée est la suivante :

$$\mathbf{f}_\sigma = \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_\Gamma \quad (2.13)$$

où δ_Γ est la fonction indicatrice de la surface. On rappelle les notations : κ correspond à la courbure de l'interface et \mathbf{n} le vecteur normal unitaire à l'interface. L'emploi du champ de phase permet de donner une approximation des termes de l'expression proposée par Brackbill. En effet, on peut écrire les approximations suivantes (se référer à [22] pour le détail) :

$$\mathbf{n}\delta_\Gamma \simeq \nabla\phi \quad (2.14)$$

pour la fonction indicatrice de l'interface,

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \quad (2.15)$$

pour le vecteur normal unitaire et finalement :

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right) \quad (2.16)$$

pour la courbure. Ainsi, la force capillaire s'écrit :

$$\mathbf{f}_\sigma = -\sigma \left(\nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right) \right) \nabla\phi \quad (2.17)$$

Les équations de conservation de la quantité de mouvement et de la masse ne s'écrivent plus aussi aisément que dans le cas monophasique. La conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho(\phi)\mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho(\phi)\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\phi) (\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)) + \rho(\phi)\mathbf{f}_V + \mathbf{f}_\sigma \quad (2.18)$$

et l'équation de conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{\partial\rho(\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(\phi)\mathbf{u}) = 0 \quad (2.19)$$

2.3.3 Discussion et choix du modèle

On vient de couvrir deux manières d'appréhender les problèmes polyphasiques, le modèle à deux fluides et le modèle continu. Les méthodes basées sur ces modèles sont appelées respectivement méthode de ***front tracking*** (suivi de front) et méthode de ***front capturing*** (capture de front). Vient maintenant la question du choix : quel modèle devrait-on choisir pour simuler les problèmes auxquels on s'intéresse ?

On souhaite étudier des phénomènes d'interaction liquide-gaz à phase dispersée, idéalement séparée. Ces phénomènes sont caractérisés par des interactions complexes entre les phases : coalescence, séparation, angle de contact avec une interface solide, etc. La complexité de ces interactions est liée à l'échelle de grandeur à laquelle ils se produisent, qui est plusieurs ordres de grandeur inférieure à l'échelle caractéristique des systèmes étudiés. Or le modèle à deux fluides peut présenter des difficultés à modéliser de si petites échelles à cause de l'hypothèse d'interface d'épaisseur nulle. Wheeler et McFadden parlent d'effondrement du modèle à deux phases «lorsque l'épaisseur interfaciale est comparable à l'échelle de longueur du phénomène examiné» [20]. D'un point de vue numérique maintenant, le modèle à deux fluides nécessite de résoudre deux domaines différents dont l'interface n'est pas fixe, ce qui demande de modifier le maillage à chaque mouvement de l'interface et rend difficile son suivi.

En apparence le choix est clair, il ne reste plus qu'à choisir un modèle continu parmi ceux de la littérature scientifique existante. Une question non-triviale subsiste néanmoins, comment définir le champ de phase qui est omniprésent dans le modèle, quelles équations le décrivent, quelles seront les difficultés numériques inhérentes à chacun de ces modèles ? Ces questions trouveront leur réponse dans la section suivante.

2.4 Méthodes continues

Le modèle continu est assez attractif au sens où le terme de force dérivé par Brackbill [21] s'exprime assez simplement en fonction du champ de phase. Ainsi, différentes approches ont émergé qui implémentent ce modèle pour faire des simulations polyphasiques. Parmi celles existantes et les mieux établies, on mentionne deux méthodes : la méthode *Volume Of Fluid* (VOF) et la méthode Level Set (LS).

2.4.1 Méthode Volume Of Fluid

Description du modèle

Dans cette méthode, on considère un champ de phase discontinu (ϕ) tel que $\phi = 0$ dans le fluide 0, et $\phi = 1$ dans le fluide 1 et l'on définit l'interface comme l'isocontour (ou isosurface en 3D) de valeur 0.5 (voir Figure 2.7). Usuellement ϕ correspond à la fraction volumique d'un des deux fluides dans chaque cellule. C'est cette définition qui rend le champ discontinu puisqu'en passant d'une cellule coupée par l'interface à une cellule contenant une phase pure, ϕ passe de 1 (ou 0) à une valeur $a \in]0, 1[$ [23]. Le champ évolue selon une équation d'advection :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (2.20)$$

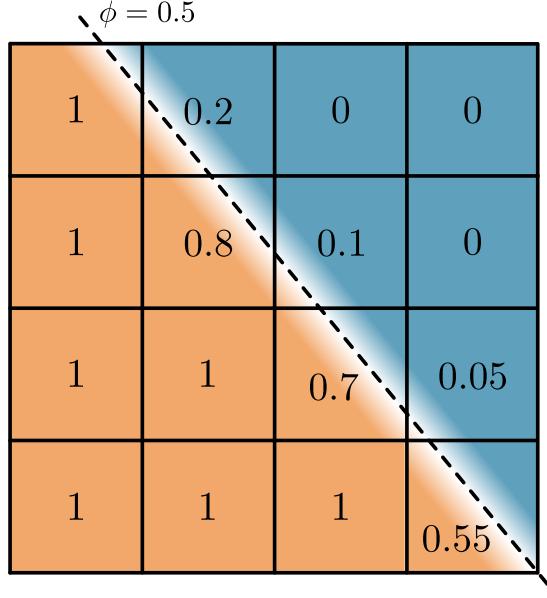


FIGURE 2.7 Représentation du champ de phase pour une interface quelconque dans le modèle VOF. $\phi = 1$ pour le fluide 1 (en orange) et $\phi = 0$ pour le fluide 0 (en bleu)

Connaissant l'évolution du champ, on peut calculer les propriétés physiques localement en utilisant une moyenne pondérée :

$$\rho(\phi) = \phi\rho_1 + (1 - \phi)\rho_0 \quad (2.21)$$

$$\mu(\phi) = \phi\mu_1 + (1 - \phi)\mu_0 \quad (2.22)$$

où ρ_i et μ_i désignent la masse volumique et la viscosité dynamique du fluide i . On peut utiliser directement (2.17) pour calculer la force de tension de surface. Cette approche a l'avantage d'être conservative [24] [23] et assez légère à implémenter puisqu'elle ne nécessite l'ajout que d'une variable supplémentaire. Néanmoins, la discrétisation de l'équation d'advection provoque un étalement de la discontinuité, à cause de la diffusion numérique introduite par les schémas. Cela rend ardu le calcul de la courbure et de la normale à l'interface car elles deviennent mal posées [24]. Cela nécessite des stratégies de reconstruction de l'interface à appliquer une fois le champ advecté, telles que les méthodes Simple Linear Interface Calculation (SLIC), proposée par Noh et Woodward [25] ou Piecewise Linear Interface Calculation (PLIC), proposée par Youngs [26]. Pour pallier la diffusion numérique, il est aussi nécessaire de d'utiliser des méthodes de *sharpening*, telle que celle proposée par Aliabadi et Tezduyar [27].

Méthode de reconstruction PLIC

Comme mentionné précédemment, l'advection du champ de phase nécessite une étape de reconstruction pour garder une interface cohérente et assurer la bonne conservation du volume. On se propose de préciser la procédure suggérée par méthode PLIC pour donner un exemple de reconstruction géométrique d'interface dans le cadre de la méthode VOF.

La méthode s'applique après l'advection du champ de phase par l'équation (2.20), les valeurs de ϕ se sont déplacées dans la direction donnée par le champ de vitesse. Dans toutes les cellules coupées par l'interface, on a $\phi \in]0, 1[$. C'est dans ces cellules que s'applique la procédure de reconstruction. Puisque la méthode est *piecewise linear*, l'interface reconstruite sera constituée de segments de droites. Étant donné une cellule coupée par l'interface, on doit connaître tout d'abord le vecteur normal au segment de la nouvelle interface. La direction de la normale est donnée par la direction du gradient du champ de phase $\nabla\phi$ dans la cellule, qui est perpendiculaire aux surfaces d'isovaleur de ϕ , particulièrement la surface d'isovaleur 0.5 qui correspond à l'interface. Ensuite, l'interface est placée dans la cellule pour la diviser en deux zones d'aire (ou de volume, en 3D) cohérentes avec la valeur de ϕ dans la cellule. Si on suppose par exemple que $\phi = 0.5$ dans une cellule, il faudra diviser la cellule en deux zones d'aire (ou volume) égales (égaux). Puisqu'il existe une infinité de coupes permettant cette division, la connaissance de la normale à l'interface permet de ne garder qu'une unique coupe. Puis la procédure est appliquée à toutes les autres cellules pour lesquelles $\phi \in]0, 1[$, et l'interface est adéquatement reconstruite, tout en respectant la conservation de la masse.

Dans les faits, cette méthode ne garantit pas la continuité de l'interface d'une cellule à l'autre, cependant, l'approximation est très bonne, à condition que l'interface ne présente pas de changements brutaux de direction qui se produiraient à l'échelle d'une cellule comme noté par Youngs [26]. On peut prévenir ce problème en diminuant la taille des cellules au voisinage de l'interface en utilisant des techniques de maillage adaptatives par exemple.

2.4.2 Méthode Level Set

Au contraire de la méthode VOF, la méthode LS propose un champ de phase continu défini comme une distance signée à l'interface. Elle a été introduite par [28] et décrite en détail dans [29]. Ainsi, le signe dépend du fluide dans lequel on se trouve, négatif dans le fluide 0, positif dans le fluide 1 et 0 à l'interface (voir Figure 2.8). Son évolution suit la même équation d'advection que le modèle VOF (équation (2.20)). La continuité du champ de phase (ϕ) rend plus facile le calcul de la courbure et du vecteur normal pour le calcul des forces de tensions de surface. En outre, le calcul des propriétés physiques n'est pas immédiat puisque

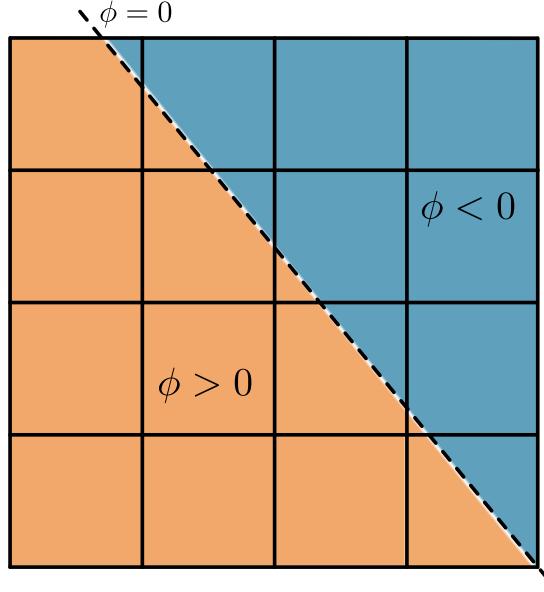


FIGURE 2.8 Représentation de la fonction de distance signée pour une interface quelconque. La distance est positive pour le fluide 1 (en orange) et négative pour le fluide 0 (en bleu)

ϕ peut prendre des valeurs arbitrairement élevées. Une fonction annexe est nécessaire pour normaliser les valeurs du champ dans chaque phase. On introduit $H(\phi)$ [30] qui est un *échelon de Heaviside étalé*, défini comme suit :

$$H(\phi) = \begin{cases} 0 & \phi < -\epsilon, \\ \frac{1}{2} + \frac{\phi}{2\epsilon} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) & -\epsilon \leq \phi \leq \epsilon, \\ 1 & \epsilon < \phi, \end{cases} \quad (2.23)$$

où ϵ est une longueur caractéristique de l'étalement de l'échelon de Heaviside. On peut donc calculer les propriétés physiques :

$$\rho(\phi) = \rho_- + (\rho_+ - \rho_-)H(\phi) \quad (2.24)$$

$$\mu(\phi) = \mu_- + (\mu_+ - \mu_-)H(\phi) \quad (2.25)$$

où les indices + et - désignent les propriétés physiques des fluides dans lesquels la distance signée est positive et négative respectivement. À chaque fois que le champ de phase est advecté et possiblement déformé par le champ de vitesse, il faut appliquer une procédure de

réinitialisation pour garder $|\nabla\phi| = 1$. Une telle procédure est décrite par Sussman et al. [31] :

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} + \text{sgn}(\phi_0)(|\nabla\phi| - 1) = 0 \quad (2.26)$$

où τ est un pseudo-temps qui n'existe que dans la procédure de réinitialisation et $\text{sgn}(\phi_0)$ la fonction de signe du champ de phase avant réinitialisation. Cependant, cette procédure de réinitialisation ne permet pas de conserver de la masse *a priori*. Pour pallier ces problèmes, de nombreuses solutions ont été proposées comme le décrivent Long et al. [32] : utiliser des schémas de discrétisation d'ordre élevé, diminuer la taille des pas de temps ou modifier la définition de la distance signée ou introduire des termes sources compensatoires. Il ne semble pas y avoir de consensus définitif sur quelle méthode adopter puisque chacune vient avec ses propres difficultés d'implémentation.

2.4.3 Conclusion partielle

Après ce bref exposé concernant les méthodes VOF et LS, on se rend compte que chaque méthode possède son point faible. D'une part, le calcul de la courbure et de la normale aux interfaces est un défaut majeur de la méthode VOF à cause de la diffusion de l'interface. La normale devient de moins en moins bien définie, et la courbure de l'interface, qui en dérive, est encore plus mal résolue. Ceci engendre des instabilités et requiert des outils supplémentaires pour réduire ces instabilités, sans résoudre le problème pour autant. D'autre part, on souhaiterait que les modèles implémentés conservent naturellement la masse, ce qui fait défaut à la méthode LS. Une manière de s'affranchir de ces problèmes serait d'avoir un modèle calculant directement la courbure comme une variable supplémentaire et intégrant la conservation de la masse dans ses équations. Ces propriétés sont celles que l'on vise car on s'intéresse aux écoulements présentant des ruptures ou des fusions d'interface, il faut donc que les forces de tension de surface soient calculées adéquatement. C'est tout l'objet de la section suivante qui traitera de la troisième méthode basée sur un modèle différent : **le modèle de Cahn-Hilliard**. Ce modèle n'est pas aussi populaire que les méthodes VOF ou LS malgré ses propriétés et sa -relative- facilité d'implémentation, ce qui a motivé de s'y intéresser de plus près.

2.5 Modèle de Cahn-Hilliard

Le modèle de Cahn-Hilliard a été proposé en 1958 par J.W Cahn et J. E. Hilliard pour décrire l'évolution de la composition de mélanges binaires [33], tels que des alliages métalliques. Ils étudient les systèmes polyphasiques d'un point de vue énergétique global en utilisant le prin-

cipe de minimisation d'énergie libre. Les systèmes tentent d'atteindre un état de minimisation de leur énergie en changeant leur structure interne, ce qui entraîne un mouvement des phases. Pour une dérivation complète de ce modèle, le lecteur pourra se référer à l'article de [34] qui propose deux preuves différentes : une approche physique basée sur les lois de la thermodynamique, et une approche mathématique basée sur la minimisation de la fonctionnelle d'énergie libre avec une contrainte de conservation de la masse.

Ce système d'équation a été utilisé pour la simulation d'écoulements polyphasiques avec beaucoup de succès pour de nombreuses applications en couplant le système d'équations avec les équations de Navier-Stokes, comme on le verra dans la suite. On peut citer, entre autres travaux, ceux de Sohaib et al. [35] sur la coalescence de bulles d'air ainsi que l'effet du cisaillement d'un fluide sur la forme de bulles de gaz, ceux de Towfighi et al. [36] sur l'interaction entre des bulles d'air dans un liquide à proximité d'une paroi solide ou encore les travaux sur la décomposition spinodale de Stoter et al. [37]. Il est possible d'étendre les modèles à des cas plus complexes tels que des fluides rhéo-fluidifiant [38], des systèmes présentant trois phases fluides [39] ou impliquant des milieux poreux [40]. Un couplage supplémentaire avec une équation d'énergie permet de simuler des systèmes comportant des transitions de phase, tel que dans les travaux de micro-fluidique avec changement de phase de [41].

Sans plus attendre, introduisons formellement les équations du modèle

2.5.1 Équations de Cahn-Hilliard

Soit Ω un système physique, union de trois sous-systèmes notés Ω_0 , Ω_1 et \mathcal{D} correspondant à deux fluides différents : le fluide 0 et le fluide 1 et à leur domaine interfacial. Notons Γ la frontière extérieure de Ω . On définit ensuite une fonction scalaire ϕ qui à un point de l'espace \mathbf{x} associe un nombre réel compris entre -1 et 1 . ϕ atteint ses bornes dans les phases pures : $\phi = 1$ dans le fluide 0 et $\phi = -1$ dans le fluide 1. De plus, ϕ varie continûment de -1 à 1 dans \mathcal{D} tel que décrit dans (2.27).

$$\phi = \begin{cases} 1 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_0 \\ a \in]-1, 1[& \forall \mathbf{x} \in \mathcal{D} \\ -1 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_1 \end{cases} \quad (2.27)$$

On introduit maintenant \mathcal{E} la fonctionnelle d'énergie libre de Helmholtz associée à Ω :

$$\mathcal{E} = \int_{\Omega} \Psi d\Omega \quad (2.28)$$

où Ψ est la densité d'énergie libre dont l'expression est :

$$\Psi = \lambda \left(F(\phi) + \frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 \right) \quad (2.29)$$

où λ est l'énergie de mélange. Cette expression se décompose en deux contributions à l'énergie libre du système : $\lambda F(\phi)$ la densité d'énergie libre en volume et $\frac{\lambda}{2} |\nabla \phi|^2$ l'énergie libre d'interface, toutes deux sont des fonctions de la répartition des phases, comme attendu. λ est coefficient de proportionnalité. Bien qu'il ne soit pas homogène à une énergie, il s'interprète comme un facteur d'échelle pour l'énergie du système et est (voir l'équation (2.40)) proportionnel au coefficient de tension de surface σ . La densité d'énergie en volume a une forme de double puits et s'exprime sous la forme d'un polynôme d'ordre 4 qui est une approximation de la forme logarithmique originelle [34] :

$$F(\phi) = \frac{(1 - \phi^2)^2}{4\varepsilon^2} \quad (2.30)$$

ε est un paramètre central des équations de Cahn-Hilliard, il correspond à une épaisseur d'interface caractéristique entre les deux phases. On introduit une variable appelée **potentiel chimique** que l'on définit comme la dérivée variationnelle de \mathcal{E} :

$$\eta = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \phi} = \lambda \left(f(\phi) - \nabla^2 \phi \right) \quad (2.31)$$

Où $f(\phi) = \frac{dF}{d\phi}$. On calcule la dérivée de F par rapport à ϕ , puis on remplace dans (2.31) :

$$\eta = \lambda \left(\frac{\phi(1 - \phi^2)}{\varepsilon^2} - \nabla^2 \phi \right) \quad (2.32)$$

On peut interpréter le potentiel chimique comme le multiplicateur de Lagrange lié à la contrainte de conservation de la masse $\int_{\Omega} \phi \, d\Omega = \bar{\phi} |\Omega| = \text{constante}$ où $\bar{\phi}$ est la moyenne de ϕ sur Ω .

On veut maintenant que le champ de phase varie en fonction des variations du potentiel chimique afin que soit assurée la minimisation de l'énergie libre du système. On introduit **J** le flux diffusif, dont on **postule** [42] l'expression suivante :

$$\mathbf{J} = -M(\phi) \nabla \eta \quad (2.33)$$

Où $M(\phi)$ est une fonction de mobilité que l'on peut interpréter comme un coefficient de diffusion, similaire au coefficient de diffusivité de la loi de Fick [43], dont la définition de

\mathbf{J} est très proche. On note que $[M(\phi)] = L^3 \cdot T \cdot M^{-1}$ dans le système d'unités international. Avec ce terme source, on peut écrire l'équation du champ de phase impliquant le potentiel chimique, ainsi qu'un terme advectif \mathbf{u} pour être le plus général possible :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (M(\phi) \nabla \eta) \quad (2.34)$$

Les équations (2.32) et (2.34) forment le système d'équation de Cahn-Hilliard. Les équations écrites permettent déjà d'étudier le comportement stationnaire des équations. Par exemple, si on considère un système à l'équilibre, ce qui correspond à $\eta = 0$ en une dimension, alors l'équation (2.32) se simplifie en l'équation différentielle suivante :

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \frac{\phi(1-\phi^2)}{\varepsilon^2} = 0 \quad (2.35)$$

Dont la solution est :

$$\phi(x) = -\tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \quad (2.36)$$

On voit donc apparaître ε comme une épaisseur caractéristique d'interface. Pour quantifier, la longueur caractéristique de transition d'une phase à l'autre, que l'on définit comme la longueur nécessaire pour passer de $\phi = -0.99$ à $\phi = 0.99$, est donnée par l'équation (2.37). On représente la solution 1D à la Figure 2.9.

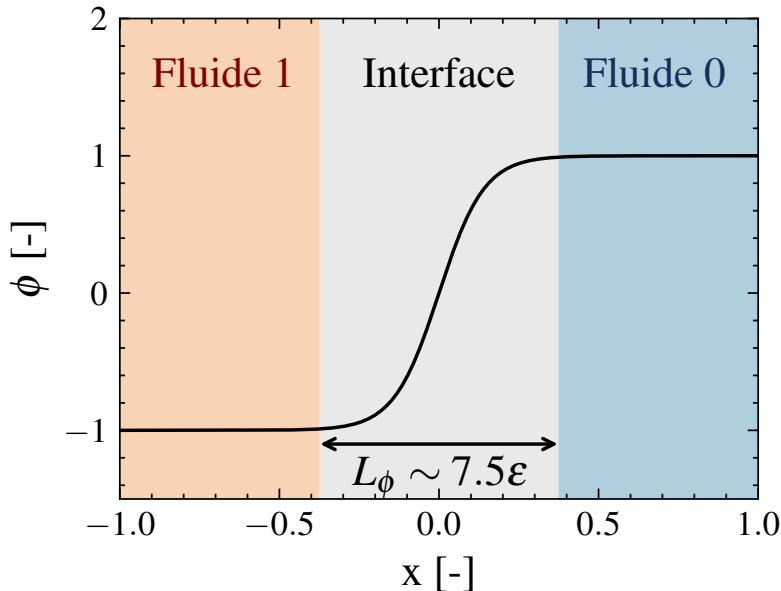


FIGURE 2.9 Solution stationnaire 1D des équations de Cahn-Hilliard. L'épaisseur de l'interface L_ϕ est proportionnelle à ε .

$$L_\phi = 2\sqrt{2} \operatorname{arctanh}(0.99) \cdot \varepsilon \quad (2.37)$$

$$\approx 7.5\varepsilon \quad (2.38)$$

On cherche maintenant à déterminer une expression pour l'énergie de mélange λ . Cahn et Hilliard définissent la tension de surface comme l'excès d'énergie libre du système due à l'interface [33], le second terme de Ψ dans (2.29). En supposant que l'on a une interface plane dans un système en équilibre, on a déterminé dans (2.36) une expression pour $\phi(x)$, et on peut alors écrire :

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 dx \quad (2.39)$$

Où σ est le coefficient de tension de surface. En injectant (2.36), et en résolvant pour λ , on a :

$$\lambda = \frac{3\varepsilon\sigma}{2\sqrt{2}} \quad (2.40)$$

Finalement, on munit les équations (2.34) et (2.32) des conditions aux frontières suivantes (appelées conditions de flux nul) :

$$(\nabla\phi \cdot \mathbf{n})|_{\partial\Omega} = 0 \quad (2.41)$$

$$(\nabla\eta \cdot \mathbf{n})|_{\partial\Omega} = 0 \quad (2.42)$$

Ainsi que des conditions initiales :

$$\phi(\mathbf{x}, t=0) = \phi_0(\mathbf{x}) \quad (2.43)$$

$$\eta(\mathbf{x}, t=0) = \eta_0(\mathbf{x}) \quad (2.44)$$

En général, on connaît le champ de phase initial ϕ_0 et on fixe le potentiel chimique initial à 0 dans tout Ω .

2.5.2 Propriétés des équations de Cahn-Hilliard

Dans cette partie, on vérifie quelques propriétés élémentaires du système d'équations de Cahn-Hilliard, à savoir la conservation de la masse et la décroissance de l'énergie libre dans le temps.

Conservation de la masse

La conservation de la masse revient à conserver le champ de phase dans le temps. On considère, sans perte de généralité, que la vitesse est nulle à l'interface. On intègre ensuite la dérivée temporelle de ϕ sur Ω :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} \phi \, d\Omega \right) &= \int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} \, d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot (M(\phi) \nabla \eta) \, d\Omega \\ &= \int_{\Gamma} M(\phi) \nabla \eta \cdot \mathbf{n} \, dS \\ &= 0 \quad \text{car } (\nabla \eta \cdot \mathbf{n})_{\Gamma} = 0 \end{aligned} \tag{2.45}$$

Ainsi, la masse totale du système est une constante dans le temps. Notons qu'on considère tous les fluides comme incompressibles, ainsi on parlera indifféremment de la conservation de la masse ou du volume.

Dissipation de l'énergie libre

Le système d'équation de Cahn-Hilliard est sensé décrire un système physique dont l'énergie libre décroît avec le temps. Pour s'assurer de cette propriété, dérivons l'énergie libre du système $\mathcal{E}(t)$ par rapport au temps pour s'assurer qu'elle est négative :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{E}(t) &= \int_{\Omega} \left[F'(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} + \varepsilon^2 \nabla \phi \cdot \nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} \right] \, d\Omega = \int_{\Omega} \eta \frac{\partial \phi}{\partial t} \, d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \eta \nabla \cdot (M \nabla \eta) \, d\Omega \\ &= \int_{\Gamma} \eta M \nabla \eta \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Omega} \nabla \eta \cdot (M \nabla \eta) \, d\Omega \\ &= - \int_{\Omega} M |\nabla \eta|^2 \, d\Omega < 0 \quad \text{car } (\nabla \eta \cdot \mathbf{n})_{\Gamma} = 0 \end{aligned}$$

L'énergie du système décroît avec le temps, ce qui montre qu'il tend vers un niveau d'énergie minimal.

2.6 Modèle de Cahn-Hilliard-Navier-Stokes

Maintenant que les équations qui décrivent l'évolution du champ de phase ont été écrites, on souhaite les coupler aux équations de Navier-Stokes. Cette tâche a été entreprise par de nombreux auteurs, à commencer par le "modèle H" de Hohenberg et Halperin en 1977 pour décrire les phénomènes de dynamique critique [44]. Ce modèle ne pouvant décrire que des systèmes avec des masses volumiques constantes (ou très proches), il a été modernisé

par Lowengrub et Truskinovsky [45] en 1998. Cependant, ce dernier modèle proposait un couplage trop fort entre la mécanique des fluides et les équations de phase d'une part, et ne permettait pas d'avoir la condition classique d'incompressibilité de l'écoulement d'autre part. Finalement, Abels et al. [46] ont proposé en 2011 un modèle proposant des masses volumiques et viscosités variables, avec un champ de vitesse solénoïdal, tout en étant consistant avec les lois de la thermodynamique. C'est ce dernier modèle qui sera utilisé dans notre étude, on peut se référer à [46] pour une dérivation complète du modèle.

Le couplage entre les deux systèmes d'équation passe par l'introduction de deux termes supplémentaires dans les équations de Navier-Stokes, introduits dans les paragraphes suivants.

2.6.1 Force de tension de surface

La présence d'une interface implique l'existence d'une force surfacique comme développé précédemment. Dans le cas du couplage Cahn-Hilliard-Navier-Stokes, ce terme a la forme d'une contrainte capillaire que l'on ajoute au tenseur des contraintes usuel :

$$\underline{\underline{T}}_\sigma = -\lambda(\nabla\phi \otimes \nabla\phi) \quad (2.46)$$

dont la forme rappelle une partie du tenseur de Korteweg, dans l'équation (2.12). Ce terme s'ajoute au tenseur des contraintes $\underline{\underline{T}}$, et on en dérive une force capillaire \mathbf{f}_σ en prenant sa divergence :

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_\sigma &= \nabla \cdot (-\lambda(\nabla\phi \otimes \nabla\phi)) \\ &= -\lambda \left(\nabla^2\phi \nabla\phi + \nabla \left(\frac{1}{2} |\nabla\phi|^2 \right) - \cancel{\nabla\phi \wedge (\nabla \wedge \nabla\phi)}^= 0 \right) \end{aligned}$$

où l'on a utilisé que le rotationnel d'un gradient est le vecteur nul. On note que $\nabla F(\phi) = f(\phi)\nabla\phi$, puis en utilisant la linéarité de l'opérateur ∇ :

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_\sigma &= \lambda \left(f(\phi) - \nabla^2\phi \right) - \nabla \left(\lambda(F(\phi) + \frac{1}{2}|\nabla\phi|^2) \right) \\ &= \eta\nabla\phi - \nabla\Psi \end{aligned} \quad (2.47)$$

De cette opération, on obtient deux termes. Le premier $\eta\nabla\phi$ est la force capillaire, ce terme est analogue au terme dérivé par Brackbill dans l'équation (2.17). Le gradient du champ de phase est inchangé, et on identifie le potentiel chimique comme un analogue de la courbure. Pour inclure le deuxième terme dans les équations, on définit une nouvelle pression $\hat{p} = p + \Psi$. Cette nouvelle pression s'avère être la même que la pression hydrostatique dans les phases

pures et varie plus doucement à l'interface [47].

2.6.2 Flux relatif diffusif

Les équations de Cahn-Hilliard permettent la diffusion d'une phase dans l'autre, et ceci doit être pris en compte dans les équations de continuité et de conservation de la quantité de mouvement. On introduit un terme appelé **flux relatif diffusif**, noté $\tilde{\mathbf{J}}$ et dont l'expression est :

$$\tilde{\mathbf{J}} = \frac{\rho_0 - \rho_1}{2} \mathbf{J} \quad (2.48)$$

où \mathbf{J} est le flux défini dans l'équation (2.33)

Tout d'abord, l'équation de continuité s'écrit :

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} + \tilde{\mathbf{J}}) = 0 \quad (2.49)$$

On ajoute ensuite le flux relatif diffusif dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement sous la forme suivante :

$$(\tilde{\mathbf{J}} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \left(\frac{\rho_0 - \rho_1}{2} \mathbf{J} \cdot \nabla \right) \mathbf{v} \quad (2.50)$$

En ajoutant la force capillaire et le flux relatif diffusif à (2.8), on obtient la forme suivante, c'est celle que l'on résout dans la suite de cette étude :

$$\begin{aligned} \rho(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) &+ \left(\frac{\rho_0 - \rho_1}{2} M(\phi) \nabla \eta \cdot \nabla \right) \mathbf{u} \\ &- \nabla \cdot (\mu(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) + \nabla \hat{p} - \eta \nabla \phi + \rho(\phi) \mathbf{f}_V = 0 \end{aligned} \quad (2.51)$$

2.7 Éléments de résolution numérique

Maintenant que les aspects théoriques purs ont été énoncés, on s'attaque aux notions de modélisation du mémoire. L'analyse mathématique pure est extrêmement utile pour formaliser les problèmes, formuler les principes physiques sous la forme d'équations et pour prouver que des solutions existent sous certaines conditions. Néanmoins, il est très rare de pouvoir obtenir des solution analytiques pour des problèmes complexes. Les méthodes numériques permettent de construire des solutions approximatives qui tendent vers les solutions réelles.

Plusieurs grandes familles de méthodes existent pour résoudre les équations formulées par la mécanique des fluides. On peut citer entre autres méthodes le trio des méthodes "finies" : la

méthode des différences finies (en anglais Finite Difference Method (FDM)), la méthode des volumes finis (en anglais Finite Volume Method (FVM) et la méthode des éléments finis (en anglais Finite Element Method (FEM)). La littérature étant principalement en anglais, on emploiera fréquemment l'abréviation anglophone dans ce mémoire.

Parmi ces méthodes, on a choisi de travailler avec la méthode des éléments finis.

2.7.1 Méthode des éléments finis

Motivations

On considère un problème physique complexe décrit par une équation aux dérivées partielles muni d'un ensemble de conditions aux frontières et de conditions initiales. On dit alors que le système est décrit par une **une forme forte**. On la dit forte car elle impose des conditions de régularité fortes sur les fonctions qui décrivent le problème. Par exemple, pour résoudre un simple problème de Poisson $\Delta u = f$, la solution u doit être deux fois dérivable et le chargement f également. Ceci limite l'emploi de chargements trop irréguliers, comment dès lors prendre en compte des discontinuités, ou l'emploi de chargements tels que des fonctions de Heaviside ou de Dirac ? De plus, un problème fort vient souvent avec des conditions aux frontières qui sont des équations supplémentaires à prendre en compte. Si on reprend le problème de Poisson précédent défini sur Ω de frontière Γ et qu'on y ajoute une condition aux frontières, on doit résoudre :

$$\begin{cases} \Delta u(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) & \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \Gamma \\ \nabla u \cdot \mathbf{n} = g(\mathbf{x}) & \forall \mathbf{x} \in \Gamma (\text{flux-nul}) \end{cases} \quad (2.52)$$

On doit donc traiter la condition aux frontières séparément.

Pour palier ces problèmes, on procède à l'affaiblissement du système, pour obtenir la **forme faible** du problème. La solution d'une telle forme n'a pas moins de valeur ou n'est pas moins précise que la forme forte, et on peut même montrer qu'avec des conditions de régularité suffisante, les deux formulations sont équivalentes [48]. La terminologie provient plutôt du fait que les contraintes de régularité demandées sur la solution sont affaiblies, par exemple, on pourrait trouver une solution au problème de Poisson qui ne serait dérivable qu'une fois avec un chargement discontinu. Aussi, cette formulation permet d'inclure naturellement les conditions aux frontières dans les équations, ce qui simplifie les calculs. Finalement, il existe des théorèmes qui s'appliquent uniquement aux formulations faibles et qui permettent de montrer qu'un problème est **bien posé au sens de Hadamard** [49]. Cette notion englobe trois critères sur la solution pour que le problème soit bien posé :

1. Existence : le problème admet une solution.
2. Unicité : sous réserve d'existence, la solution est unique.
3. Continuité par rapport aux données : la solution doit varier *peu*, si les données du problème changent *peu*.

Ce dernier point est essentiel car dans la réalité, on ne connaît les données du problème que jusqu'à une certaine précision, ainsi on ne peut pas admettre que la solution d'un problème varie grandement pour une variation infinitésimale des données. Pour prouver qu'un problème est bien posé, on utilise le **théorème de Lax-Milgram**, ou sa forme généralisée utilisant la **condition inf-sup de Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi (LBB)** [50].

Concrètement, comment arrive-t-on à la forme faible ? La relaxation de la régularité de la solution donne une indication sur la méthode à employer : on veut diminuer l'ordre de dérivation de la solution. C'est ce qu'on fait usuellement lorsque l'on veut calculer des intégrales complexes, il est plus facile de dériver ou de primitiver l'intégrande pour faciliter les calculs, et on va suivre la même démarche ici.

Obtention de la forme faible

Avant toute chose, définissons les espaces de fonctions qui seront utiles dans cette étude. Soit Ω un espace n-dimensionnel. Dans la suite, tout sera écrit comme si $n \geq 2$, ce qui sera le cas de toute cette étude.

- $L^2(\Omega) = \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} \|u\|^2 d\Omega < \infty\}$
- $H^1(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega), \int_{\Omega} \|\nabla u\|^2 d\Omega < \infty\}$

En prenant des fonctions dans ces espaces, on sera assuré que les intégrales qu'on s'apprête à écrire existent, grâce aux inégalités de Cauchy-Schwarz [51] et de Poincaré [52]. Pour appliquer le théorème d'intégration par parties, on a besoin d'une deuxième fonction. Soit $v \in H^1(\Omega)$, on multiplie la première équation de (2.52) et intégrons sur Ω :

$$I = \int_{\Omega} v \Delta u \, d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot (v \nabla u) \, d\Omega - \int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla u \, d\Omega \quad (2.53)$$

On a besoin du théorème de Green-Ostrogradksy (ou théorème de la divergence) pour faire apparaître les termes aux frontières :

$$\int_{\Gamma} v \nabla u \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla u \, d\Omega = \int_{\Omega} v f \, d\Omega \quad (2.54)$$

$$\int_{\Gamma} v g \, d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla u \, d\Omega = \int_{\Omega} v f \, d\Omega \quad (2.55)$$

Si l'on regarde les intégrales écrites, on se rend compte que la solution u doit au moins appartenir à $H^1(\Omega)$ pour que les intégrales existent. Ainsi, l'énoncé de la forme faible du problème est :

$$\text{Trouver } u \in H^1(\Omega) \text{ tel que } \forall v \in H^1(\Omega), \int_{\Gamma} vg \, d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla u \, d\Omega = \int_{\Omega} vf \, d\Omega \quad (2.56)$$

Ainsi, on cherche bien u dans un espace de fonctions moins restreignant que celui du problème fort d'origine, et on a pu intégrer l'équation sur le domaine et la condition aux frontières dans la même équation.

Discrétisation du domaine

Bien que le problème ait été simplifié, on est encore loin de pouvoir obtenir une solution numérique pour notre problème. Premièrement, transformons le domaine continu, Ω , en un domaine discréteisé Ω_h constitué d'éléments simples. Si Ω est un domaine 2D, ces éléments simples peuvent être des triangles, des carrés, etc. De même en 3D, ce peut être des tétraèdres, des hexaèdres ou autres. L'idée sous-jacente est d'être capable de calculer simplement la solution sur chaque élément pour pouvoir ensuite exprimer la solution entière comme la somme de chaque solution élémentaire. Pour calculer en chaque point, on emploie des fonctions d'interpolation, appelées communément *fonctions chapeau* (voir Figure 2.10) ou fonctions de base, qui prennent la valeur 1 en un point donné et 0 sur tous les autres points du domaine. On note v_i une telle fonction d'interpolation valant 1 au point i du domaine. Ainsi, plutôt que de trouver une solution u au problème, on trouve une solution u_h discréteisée qui s'écrit comme une somme pondérée des fonctions v_i :

$$u_h(\mathbf{x}) = \sum_i v_i(\mathbf{x}) u_i \quad (2.57)$$

où u_i est la valeur que prend u_h au point i , ce qu'on appelle aussi les **degrés de liberté** (en anglais Degrees of Freedom (DoFs)). Si on note de manière générale U et V les espaces de fonctions dans lesquels u et v existent, alors on notera U_h et V_h leur homologue discréteisé, où h est un paramètre de discréteisation (*e.g* la taille caractéristique d'un élément du maillage). Plus les éléments du domaines sont petits, meilleure est l'approximation de la solution mais plus grand est le prix de la simulation.

La Figure 2.10 représente une fonction d'interpolation linéaire, mais il est tout à fait possible d'interpoler les solutions avec des polynômes de degré plus élevé. Sur la Figure 2.11, on a représenté des fonctions d'interpolation sur un élément 1D pour différents degrés d'interpo-

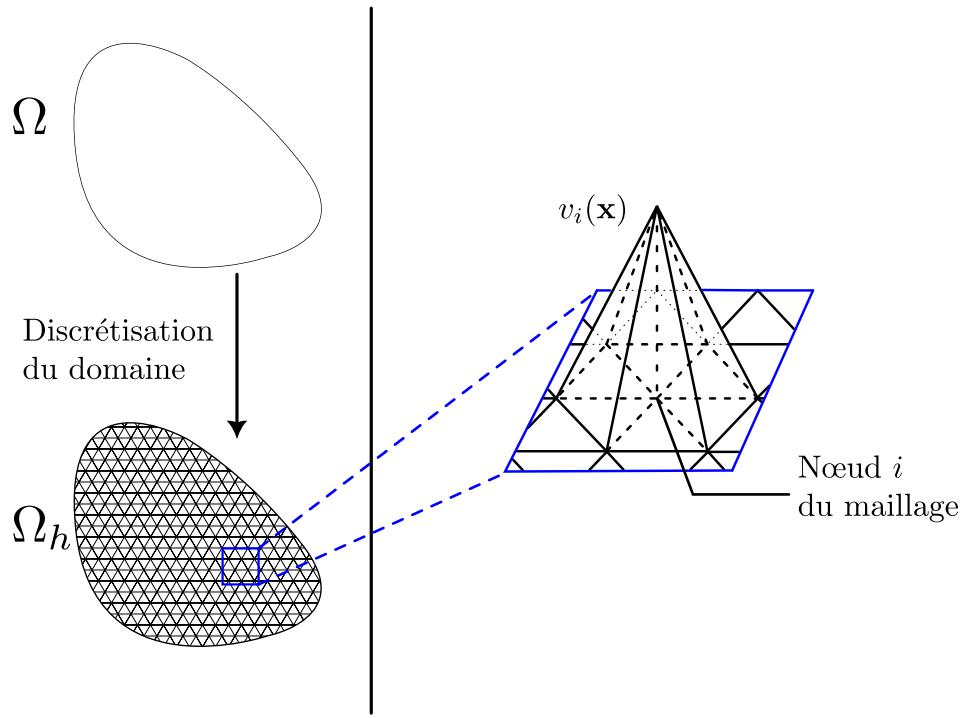


FIGURE 2.10 On discrétise le domaine Ω 2D en Ω_h sur lequel on définit une fonction d'interpolation (linéaire sur le schéma) en chaque nœud du maillage. Inspiré de [5].

lation. Plus le degré d'interpolation est élevé, plus le nombre de nœuds associé à l'élément augmente. C'est une autre manière d'augmenter la précision de la solution numérique.

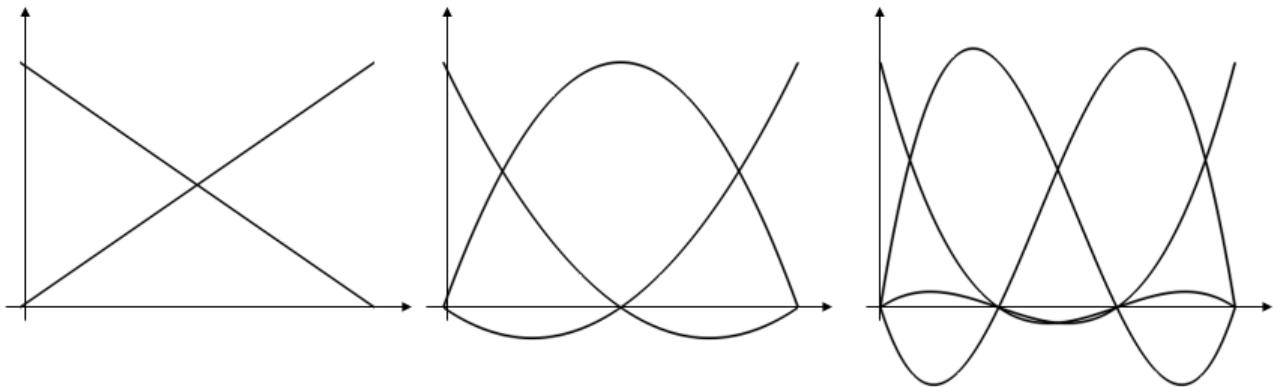


FIGURE 2.11 Fonctions d'interpolation 1D pour différents degrés d'interpolation. De gauche à droite, polynômes de degré 1, 2 et 3. Tiré sans modification de [6]

Une des possibilités offerte par la méthode des éléments finis est le raffinement du maillage en certains de ses points pour réduire l'erreur sur une métrique donnée. Dans notre cas, on

veut décrire le plus précisément les phénomènes à l'interface entre les fluides, on va donc naturellement vouloir mettre plus d'éléments à proximité de ces zones. L'utilisation d'estimateurs d'erreur (tel que l'estimateur de Kelly [53]) de raffiner adaptativement le maillage à proximité de l'interface et de garder les zones loin de l'interface dé-raffinées. Cette méthode est très pertinente pour la modélisation d'interface et motive le choix de la méthode des éléments finis.

Méthode de Galerkine

On est arrivé à introduire deux espaces de fonction, U dans lequel on a introduit la formulation faible et U_h où l'on peut trouver une solution discrétisée au problème. Pour réunir ces deux résultats, on introduit le **principe d'orthogonalité de Galerkine**. Ce résultat est basé sur le principe suivant : il est plus facile de trouver des solutions dans l'espace de fonctions discrétisé U_h . Ainsi on veut trouver u_h qui soit le plus *proche* possible de u , la solution dans l'espace continu U . Cette opération de *trouver l'élément d'un espace A le plus proche d'un espace B* est reliée à la notion de projection orthogonale, elle même liée à la notion de produit scalaire. La projection orthogonale de u sur l'espace des solutions numériques amène à la solution u_h . Le principe d'orthogonalité permet d'écrire :

$$\forall i \in [1, n], \quad \int_{\Omega} (\Delta u - \Delta u_h) \cdot v_i d\Omega = 0 \quad (2.58)$$

On remplace Δu par $f(\mathbf{x})$ puis on suit le même cheminement que pour la forme faible pour arriver à :

$$\text{Trouver } u_h \in U_h \text{ tel que } \forall i \in [1, n], \quad \int_{\Gamma} v_i g d\Gamma - \sum_j \int_{\Omega} (\nabla v_i \cdot \nabla v_j) u_i d\Omega = \int_{\Omega} v_i f d\Omega \quad (2.59)$$

Les intégrales sont calculées par des formules de quadrature (Gauss-Legendre ici [54]) pour simplifier les calculs : sur chaque cellule du maillage, on définit des points de quadrature x_q en lesquels on évalue l'intégrande avec le poids associé w_q . On prend garde qu'en général, les points de quadrature sont différents des noeuds du maillage. Si l'on considère une fonction f générique que l'on veut intégrer sur une cellule Ω_k du maillage, alors la formule de quadrature permet d'écrire :

$$\int_{\Omega_k} f(\mathbf{x}) d\Omega_k \approx \sum_q f(\mathbf{x}_q) w_q \quad (2.60)$$

où q est le nombre de points de quadrature choisis. En appliquant les formules de quadrature à (2.59), on obtient un système matriciel $AU = F$, que l'on peut résoudre ensuite à l'aide de solveurs direct ou itératif. Les inconnues du problèmes sont les u_i contenues dans U ,

c'est à dire les valeurs de la solution numérique u_h aux noeuds i . Les éléments de la matrice correspondent aux intégrales dont l'intégrande fait apparaître v_i et v_j . Les éléments de F correspondent au terme de chargement.

2.7.2 Problèmes transitoires et non-linéaires

Le problème de Poisson traité précédemment a permis, de par sa simplicité, d'introduire la méthode des éléments finis assez simplement et d'en donner les grands principes. Cependant, de nombreux problèmes présentent des complexités qui nécessitent des outils supplémentaires pour les traiter. Dans cette étude, les problèmes que l'on traite sont décrits par des équations qui sont non seulement transitoires (*i.e* qui dépendent du temps) mais aussi non-linéaires, comme en témoignent les équations (2.51) ou (2.34). Ceci appelle à l'utilisation de méthodes dédiées qui seront l'objet de cette partie.

Problèmes transitoires

La dépendance au temps des variables apparaît en général à cause de dérivées temporelles dans nos équations. Là-encore, on procède à une discrétisation de l'intervalle de temps $[0, T]$, où T est le temps final de la simulation, et l'on découpe l'intervalle en pas de temps élémentaires Δt . On considère un problème instationnaire général :

$$\begin{cases} y' = f(y, t) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \quad (2.61)$$

La dérivée temporelle peut être discrétisée par les formules de différentiation arrière d'Euler [55] (en anglais Backward Differentiation Formula (BDF)). L'idée générale est d'exprimer la valeur de y au temps t_{n+1} connaissant les n pas de temps précédents et connaissant la condition initiale qui est une donnée du problème. Pour une méthode d'ordre p , on a besoin de connaître p valeurs de la fonction, soit la valeur de y aux p pas de temps précédents :

$$\gamma_0 y^{n+1} + \sum_{i=1}^p \gamma_i y^{n+1-i} = f(t_{n+1}, y^{n+1}) \quad (2.62)$$

Les coefficients γ_i sont déterminés mathématiquement et ne dépendent pas du problème traité. On a évalué f en (t_{n+1}, y_{n+1}) car c'est une famille de méthodes **implicites**. À cause de cela, il faut résoudre un système car f dépend explicitement de y_{n+1} . On choisit des méthodes implicites car elles sont plus stables que leur homologues explicites, et permettent de relaxer les contraintes sur la taille des pas de temps.

Problèmes non-linéaires

Les méthodes BDF font apparaître naturellement des systèmes d'équation, qui sont non-linéaires dans notre étude. Pour les résoudre, on utilise la méthode de **Newton-Raphson**. On considère un système d'équations non-linéaire à n inconnues :

$$\text{Trouver } \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \text{ tel que } \mathcal{R}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.63)$$

La méthode consiste à calculer la matrice jacobienne $\mathcal{J}(\mathbf{x})$ pour se rapprocher de la solution par des itérations successives jusqu'à une certaine tolérance. À chaque itération de la méthode, on calcule $\delta\mathbf{x}$ en résolvant le système suivant :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}_k)\delta\mathbf{x}_k = -\mathcal{R}(\mathbf{x}_k) \quad (2.64)$$

Puis on met à jour la valeur de la solution : $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \delta\mathbf{x}_k$, et ainsi de suite, jusqu'à ce que $\delta\mathbf{x}_k$ soit suffisamment petit, selon un critère déterminé par l'utilisateur. On considérera à ce moment là que la solution obtenue est assez proche de la vraie solution.

2.7.3 Résolution du système linéaire

Après avoir suivi toutes les étapes décrites précédemment, on devrait arriver -enfin!- à résoudre un système linéaire. Dans le monde des éléments finis, rares sont ceux qui résolvent le systèmes matriciels par des méthodes directes, et pour cause : le nombre colossal d'inconnues dans le système à résoudre qui mène à une matrice encore plus grande encore. Parmi la pléthora de solveurs linéaires existant, celui utilisé dans ce travail est le solveur **Generalized Minimal RESidual method (GMRES)**, accompagné d'un préconditionneur Incomplete Lower Upper (ILU).

2.7.4 Synthèse des éléments numériques

Tout au long de cette partie, on a traité des problèmes numériques qu'on rencontrera dans notre étude pour être capable de faire des simulations numériques. Puis, pour chaque problème, on a proposé une solution décrite mathématiquement pour plus de généralité. On se propose ici de résumer de manière synthétique les étapes successives pour avoir une vision plus globale du processus de calcul :

1. **Formulation continue du problème** : sous forme d'un système d'équations muni de conditions aux frontières et de conditions initiales.
2. **Formulation faible du problème** : on multiplie par une fonction test, puis on utilise l'intégration par partie et le théorème de la divergence pour faire apparaître les termes aux frontières explicitement.
3. **Discrétisation du domaine** : on écrit la solution comme une somme de fonctions d'interpolations, la méthode de Galerkine permet d'obtenir un système d'équations non-linéaire et transitoire.
4. **Discrétisation de la dérivée temporelle** : le système semi-discrétisé (en espace seulement) est complètement discrétisé. On résout le problème en temps par itérations successives de la méthode BDF.
5. **Linéarisation du système** : grâce à la méthode de Newton-Raphson, on passe d'un problème non-linéaire à un problème linéaire que l'on doit résoudre à chaque pas de temps.
6. **Résolution du système linéaire** : il ne reste plus qu'à résoudre le système matriciel $AX = B$ pour chaque itération de la méthode de Newton pour avancer d'un pas de temps, et ainsi de suite...

2.8 Synthèse de la revue de littérature et lignes directrices

Cette revue de littérature a permis de poser les bases théoriques décrivant les écoulements polyphasiques et de constater qu'il existe de nombreuses manières de les décrire, menant naturellement à plusieurs modèles pour en faire des simulations numériques. On a notamment distingué le modèle à deux fluides du modèle continu qui sont reliés respectivement aux formalismes Lagrangien et Eulérien. Dans le cadre de ce mémoire, qui se concentre sur les écoulements à phases dispersées idéalement séparées, il a été déterminé que le modèle continu était le plus adapté à la simulation de ces écoulements. Après une introduction aux différentes approches issues du modèle continu, on a dû choisir entre différentes propositions : VOF, LS ou Cahn-Hilliard. Ceci a orienté notre étude vers le modèle de Cahn-Hilliard qui, couplé aux équations de Navier-Stokes, permet de simuler les phénomènes complexes liés à la coalescence ou à la rupture d'interface car les équations sont basées sur le modèle fluide continu. Grâce à ce modèle, on s'affranchit aussi des inconvénients des modèles classiques, notamment le calcul de la courbure et de la normale à l'interface. L'approche numérique par la méthode des éléments finis, bien que lourde à mettre en place, donne accès à des outils très utiles pour ces simulations tels que le raffinement adaptatif du maillage et permet de gérer aisément les différentes conditions aux frontières dont on aura besoin. C'est le cadre numérique idéal pour

montrer les forces du modèle de Cahn-Hilliard (et son couplage avec Navier-Stokes) qui est peu utilisé en comparaison aux modèles VOF et LS. Ceci justifie qu'on s'y intéresse, d'autant plus que la littérature scientifique présente de nombreuses variations au modèle, que ce soit dans les termes ajoutés dans la conservation de quantité de mouvement, l'équation du champ de phase ou celle du potentiel chimique, sans validation claire de leur performance respective. Ces éléments ayant été présentés, il reste à définir clairement les objectifs de ce mémoire et la méthodologie, qui seront l'objet de la partie suivante.

CHAPITRE 3 OBJECTIF ET ORGANISATION

3.1 Objectif du travail de recherche

À la lumière des éléments de la revue de littérature, l'objectif de ce mémoire est de développer un modèle de Cahn-Hilliard-Navier-Stokes afin de simuler des écoulements polyphasiques. Le but est double : prendre un main un modèle peu utilisé et vérifier qu'il est capable de produire des résultats conformes à la théorie ou qui concordent avec des résultats numériques établis, d'une part. D'autre part, le but est d'identifier les forces et faiblesses du modèle, autant sur des cas de *benchmark* que sur un exemple plus conséquent. Ainsi, l'objectif de ce travail de recherche est le suivant :

Développer, implémenter et étalonner un modèle de Cahn-Hilliard-Navier-Stokes pour la simulation d'écoulements polyphasiques

Le travail est divisé en trois sous-objectifs :

- **S.O 1** : Implémenter le modèle de Cahn-Hilliard
 1. Développer un solveur Cahn-Hilliard.
 2. Intégrer le système d'équations choisi à l'architecture logicielle.
 3. Vérifier l'implémentation et la convergence des équations.
- **S.O 2** : Coupler les équations de Cahn-Hilliard aux équations de Navier-Stokes
 1. Établir les équations de couplage.
 2. Mettre en relation les deux solveurs.
- **S.O 3** : Vérifier et étalonner le modèle Cahn-Hilliard-Navier-Stokes
 1. Simuler des cas classiques et comparer les résultats obtenus à une autre méthode de résolution d'écoulements polyphasiques.
 2. Simuler un problème industriel : le décollement de bulle en flux de cisaillement.
 3. À partir des cas traités : diagnostiquer le modèle et conclure sur ses forces, ses faiblesses et ses particularités.

3.2 Organisation du mémoire

Le sous-objectif **S.O 1** sera traité dans le chapitre 5 de ce mémoire, notamment la forme faible et la résolution du système subséquent seront présentés dans la section 5.1. Puis la

vérification (**S.O 1.3**) par la méthode des solutions manufacturées suivra dans 5.3. Les sous-objectifs **S.O 2** et **S.O 3** seront traités dans le chapitre 6 où on expliquera d'abord la stratégie de couplage entre les deux systèmes d'équation avant de passer en revue les cas de *benchmark* simulés. Une attention particulière sera consacrée à l'exemple du sous-sous-objectif **S.O 3.2**. On procédera à une analyse de convergence de maillage puis à un balayage paramétrique pour que notre étude soit la plus complète possible.

CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE

Tous les codes ayant été écrits dans ce mémoire ont été écrits dans le logiciel Lethe [15].

Lethe est un logiciel en source ouverte (*open-source*) de mécanique des fluides numérique parallèle basé sur les méthodes de communication *Message Passing Interface* (MPI) [56], utilisant la méthode des éléments finis. Le logiciel est aussi capable de coupler d'autres physiques au solveur de mécanique des fluides pour prendre en compte des effets thermiques, des traceurs ou des phases différentes. En outre, les propriétés physiques (masse volumique, viscosité, capacité thermique, etc.) peuvent dépendre des champs résolus. Lethe est écrit en C++, et est basé sur trois librairies écrites dans le même langage que sont **deal.II** [57], **Trilinos** [58] et **p4est** [59]. **deal.II** est une librairie *open-source* implémentant la méthode des éléments finis et permettant la génération de maillages de formes variées en 2D et 3D. Toutes les fonctionnalités nécessaires à l'implémentation des éléments finis y sont présentes, on peut ainsi définir les types d'éléments finis voulus, itérer facilement sur les cellules des maillages et accéder aux valeurs des champs pour l'assemblage des matrices. **deal.II** est également dotée d'une fonctionnalité d'adaptation de maillage basée sur l'estimateur de Kelly [53], qui permet de résoudre plus précisément les zones d'intérêt. Cela permet de concentrer les efforts de calcul là où ils sont nécessaires, et donc de gagner en performance. Une fois les systèmes linéaires assemblés, la résolution numérique se fait par des méthodes directes ou itératives qui sont implémentées dans la librairie **Trilinos**. Cette librairie est spécialisée dans l'algèbre linéaire des matrices creuses qui constituent la grande majorité des systèmes linéaires que l'on résout. La dernière librairie **p4est** permet la répartition des maillages sur plusieurs processeurs en même temps grâce au stockage du domaine numérique dans des structures de *quadtreees* et d'*octreees*. Ainsi, il est possible de lancer des simulations en parallèle, sur des machines personnelles ou des clusters de calcul, ce qui implique des gains de performances conséquents.

Au cœur de Lethe se trouve le solveur Navier-Stokes. Le système d'équation est linéarisé par la méthode de Newton et le système linéaire obtenu est résolu par la méthode GMRES. On s'intéresse particulièrement à la manière dont on écrit un couplage entre deux physiques dans Lethe. Deux approches sont possibles. La première méthode est de résoudre le système d'équations couplée d'un coup, ce qu'on appelle une méthode monolithique. On y préfère une seconde méthode qui consiste à résoudre à chaque pas de temps une physique après l'autre qui est plus simple d'implémentation et plus facile à paramétriser. Il suffit en effet d'être capable de résoudre chaque physique indépendamment : Cahn-Hilliard d'une part et Navier-

Stokes d'autre. Dans notre cas, on résout à chaque pas de temps le système de Cahn-Hilliard d'abord pour obtenir les valeurs du champ de phase et du potentiel chimique. On en déduit ensuite les valeurs des propriétés physiques (viscosité et masse volumique) qui dépendent du champ de phase et les forces (tension de surface et flux relatif diffusif). Ces grandeurs sont ensuite injectées dans un solveur de Navier-Stokes par le moyen d'une interface C++ appelée **Multiphysics** qui fait le lien entre Navier-Stokes et toutes les autres physiques présentes dans le problème et que l'utilisateur aura spécifiées. On en déduit les valeurs de vitesse et de pression dans l'espace. Puis au pas de temps suivant, on résout Cahn-Hilliard en connaissant le champ de vitesse et ainsi de suite. Pour le premier pas de temps, tous les champs sont initialisés, ce qui donne la valeur de la vitesse pour la première résolution de Cahn-Hilliard.

Une fois la simulation terminée, on peut obtenir des valeurs directement post-traitées pendant la simulation et regroupées dans des tables. Des fichiers au format **.vtu**, **.pvtu** et **.pv** sont également créés à une fréquence fixe pendant la simulation. Ils sont utiles pour la visualisation, en utilisant le logiciel *open-source* Paraview [60].

CHAPITRE 5 MODÈLE DE CAHN-HILLIARD

Dans cette partie, on se propose d'implémenter les équations de Cahn-Hilliard et de les appliquer à des cas permettant de montrer le type de problème qu'elles permettent de résoudre. Tout d'abord, on rappelle les équations à partir desquelles on écrit la formulation faible du problème. Cela comprend la discrétisation de la dérivée temporelle et la résolution du problème non-linéaire. On traite ensuite du paramétrage des paramètres du système. Pour vérifier l'implémentation du code, on effectue une méthode des solutions manufacturées suivie d'un cas test de décomposition spinodale d'une mixture de fluides.

5.1 Rappel des équations

Dans cette partie, on s'attaque à la résolution du système d'équations de Cahn-Hilliard sur un domaine Ω de frontière Γ . On considère que la mobilité est une fonction constante telle que $M(\phi) = D$.

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (D \nabla \eta) & \text{sur } \Omega \\ \eta - \lambda \frac{(\phi^3 - \phi)}{\varepsilon^2} + \lambda \nabla^2 \phi = 0 & \text{sur } \Omega \\ \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = n_\phi(\phi, \nabla \phi, \mathbf{x}, t) & \text{sur } \Gamma_{\phi,n} \\ \nabla \eta \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\eta,n} \\ \phi = g(\mathbf{x}, t) & \text{sur } \Gamma_{\phi,d} \\ \eta = h(\mathbf{x}, t) & \text{sur } \Gamma_{\eta,d} \end{cases} \quad (5.1)$$

où $\Gamma_{x,n}$ et $\Gamma_{x,d}$ sont les frontières où l'on applique respectivement une condition de Neumann et une condition de Dirichlet sur la variable x (ϕ ou η). Ces frontières sont définies telles que $\Gamma_{x,n} \cup \Gamma_{x,d} = \Gamma$ et $\Gamma_{x,n} \cap \Gamma_{x,d} = \emptyset$. On précisera ces conditions selon les exemples étudiés en notant néanmoins que l'on prend toujours une condition de flux nul pour η . Pour n_ϕ , trois options seront considérées dans la suite :

$$n_\phi = \begin{cases} 0 & (\text{flux-nul}) \\ -|\nabla \phi| \cos(\alpha_c) & (\text{condition d'angle de contact de valeur } \gamma) \\ \text{libre, donc } \nabla \phi \cdot \mathbf{n} \text{ est une inconnue du problème} \end{cases} \quad (5.2)$$

On précise ce que signifie la condition *libre* : dans certains problèmes, on ne connaît pas a priori l'angle de contact entre la surface et le liquide, c'est le cas dans l'exemple de rupture

de digue du chapitre suivant. Dans cet exemple, du liquide glisse sur une surface et imposer un angle de contact pourrait ralentir artificiellement son glissement. Ainsi, en laissant la condition libre, la solution du système est celle qui minimise le plus l'énergie libre, il peut s'agir d'un angle de contact arbitraire entre 0° et 180° .

On précisera pour chaque problème quelles conditions aux frontière sont utilisées. Dans la suite, on considérera une condition de flux-nul pour simplifier les calculs présentés.

5.2 Résolution numérique des équations

Dans cette partie, on va suivre la progression présentée dans la section 2.7 afin de résoudre le système d'équations de Cahn-Hilliard. Quelques adaptations seront nécessaires car on résout pour deux variables plutôt qu'une. On évoquera à la fin la question des paramètres physico-numériques ε et D pour savoir quelles valeurs leur donner selon le type de problème rencontré et leur influence sur le problème.

5.2.1 Formulation faible du problème

Écrivons tout d'abord la forme faible du problème. Pour cela, on définit Ω un système physique de frontière Γ . On note $H^1(\Omega) \times [0, T] = \{u \in L^2(\Omega) \times [0, T], \int_{\Omega} (u')^2 d\Omega < \infty\}$ où $H^1(\Omega)$ est tel qu'introduit dans la revue de littérature. On multiplie cet ensemble par l'intervalle $[0, T]$ pour montrer que les fonctions dépendent du temps $t \in [0, T]$. On considère un couple de fonctions test α et β appartenant à $H^1(\Omega) \times [0, T]$ associées respectivement à ϕ et η . On multiplie les équations par leur fonction test, puis on intègre sur Ω :

$$\int_{\Omega} \alpha \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (D \nabla \eta) \right) d\Omega = 0 \quad (5.3)$$

$$\int_{\Omega} \beta \left(\eta - \lambda \frac{(\phi^3 - \phi)}{\varepsilon^2} - \lambda \nabla^2 \phi \right) d\Omega = 0 \quad (5.4)$$

On intègre par partie les dérivées d'ordre 2 puis on utilise le théorème de la divergence pour faire apparaître les conditions aux frontières, que l'on décompose selon les conditions aux frontière de Dirichlet et de Neumann :

$$\int_{\Omega} \alpha \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi \right) d\Omega - \int_{\Omega} D \nabla \alpha \cdot \nabla \eta d\Omega + \int_{\Gamma_{\eta,n}} D \alpha \nabla \eta \cdot \mathbf{n} d\Gamma + \int_{\Gamma_{\eta,d}} D \alpha \nabla \eta \cdot \mathbf{n} d\Gamma = 0 \quad (5.5)$$

$$\int_{\Omega} \beta \eta - \beta \lambda \frac{(\phi^3 - \phi)}{\varepsilon^2} d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \beta \cdot \lambda \nabla \phi d\Omega + \int_{\Gamma_{\phi,n}} \alpha \lambda \nabla \phi \cdot \mathbf{n} d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi,d}} \alpha \lambda \nabla \phi \cdot \mathbf{n} d\Gamma = 0 \quad (5.6)$$

Puisque l'on connaît la valeur de ϕ et η là où on applique les conditions de Dirichlet, il n'y a pas besoin de les tester, donc les fonctions tests sont nulles sur $\Gamma_{\phi,d}$ et $\Gamma_{\eta,d}$. De plus, on prend des conditions de flux-nul à la frontière $\Gamma_{\phi,n}$ ($n_\phi = 0$). Ainsi, les équations du problème faible s'écrivent comme suit :

$$\int_{\Omega} \alpha \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi \right) d\Omega - \int_{\Omega} D \nabla \alpha \cdot \nabla \eta d\Omega = 0 \quad (5.7)$$

$$\int_{\Omega} \beta \eta - \beta \lambda \frac{(\phi^3 - \phi)}{\varepsilon^2} d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \beta \cdot \lambda \nabla \phi d\Omega = 0 \quad (5.8)$$

5.2.2 Discrétisation du problème

On utilise la méthode de Galerkine pour la discrétisation ce qui implique que les fonctions test correspondent aux fonctions d'interpolation α_i et β_i , chacune étant associée à un degré de liberté. Puisque le système d'équations comporte deux variables, il y aura des degrés de liberté associés au champ de phase et au potentiel chimique. On utilise une astuce numérique pour reformuler le problème à deux équations en une seule qui consiste à ce que les fonctions d'interpolation valent 0 si le degré de liberté ne concerne pas la variable à laquelle elles sont rattachées. Concrètement, cela permet d'écrire les deux équations en une seule, comme suit :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \alpha_i \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi \right) d\Omega - \int_{\Omega} D \nabla \alpha_i \cdot \nabla \eta d\Omega \\ + \int_{\Omega} \beta_i \eta - \beta_i \lambda \frac{(\phi^3 - \phi)}{\varepsilon^2} d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \beta_i \cdot \lambda \nabla \phi d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (5.9)$$

5.2.3 Résolution du problème transitoire et non-linéaire

On résout d'abord le problème transitoire, les notations sont les mêmes qu'employées dans la sous-section 2.7.2 traitant des problèmes transitaires. Le problème s'écrit :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \alpha_i \left(\gamma_0 \phi^{n+1} + \sum_{i=1}^p \gamma_i \phi^{n+1-i} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi^{n+1} \right) d\Omega - \int_{\Omega} D \nabla \alpha_i \cdot \nabla \eta^{n+1} d\Omega \\ + \int_{\Omega} \beta_i \eta^{n+1} - \beta_i \lambda \frac{((\phi^{n+1})^3 - \phi^{n+1})}{\varepsilon^2} d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \beta_i \cdot \lambda \nabla \phi^{n+1} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (5.10)$$

On note que $\gamma_0 = 1$, ce qui simplifie légèrement l'écriture. Dans cette équation, les inconnues sont les variables portant l'exposant $n+1$, toutes les autres sont connues grâce aux itérations précédentes. On peut connaître la toute première itération car on connaît les champs au temps $t = t_0$, grâce aux conditions initiales. On remarque de plus que le potentiel chimique à l'itération temporelle $n+1$ ne dépend pas des valeurs précédentes de potentiel, mais

uniquement de la valeur de ϕ . Ceci signifie que l'information du potentiel chimique est mise à jour sans déphasage sur tout le domaine, en se basant uniquement sur les valeurs du champ de phase. Il y a une propagation instantanée de l'information.

On résout maintenant le système non-linéaire, pour cela on écrit $\mathcal{R}_{i,k}$ le terme à la i -ème ligne du résiduel à la k -ième itération de la méthode de Newton :

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_{i,k}^{n+1} = & \int_{\Omega} \alpha_i \left(\phi_k^{n+1} + \sum_{i=1}^p \gamma_i \phi^{n+1-i} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_k^{n+1} \right) d\Omega - \int_{\Omega} D \nabla \alpha_i \cdot \nabla \eta_k^{n+1} d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \beta_i \eta_k^{n+1} - \beta_i \lambda \frac{((\phi_k^{n+1})^3 - \phi_k^{n+1})}{\varepsilon^2} d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \beta_i \cdot \lambda \nabla \phi_k^{n+1} d\Omega\end{aligned}\quad (5.11)$$

et $\mathcal{J}_{ij,k}^{n+1}$ le terme de la i -ème ligne, j -ème colonne au $n+1$ -ème pas de temps à la k -ième itération de Newton de la matrice jacobienne du système :

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_{ij,k}^{n+1} = & \int_{\Omega} \alpha_i (\alpha_j + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha_j) d\Omega - \int_{\Omega} D \nabla \alpha_i \cdot \nabla \beta_j d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \beta_i \beta_j - \beta_i \lambda \alpha_j \frac{(3(\phi_k^{n+1})^2 - 1)}{\varepsilon^2} d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \beta_i \cdot \lambda \nabla \alpha_j d\Omega\end{aligned}\quad (5.12)$$

où l'on a utilisé les formes discrétisées de ϕ et η :

$$\phi \approx \phi_h = \sum_j \phi_j \alpha_j \quad (5.13)$$

$$\eta \approx \eta_h = \sum_j \eta_j \beta_j \quad (5.14)$$

On a conservé l'exposant $n+1$ pour garder à l'esprit que les itérations de la méthode de Newton permettent de résoudre le système non-linéaire qui se pose à chaque pas de temps. Les notations étant assez lourdes, il est facile de se perdre dans ce que l'on doit calculer. On rappelle donc qu'à chaque itération de Newton, on calcule le vecteur de correction $\delta \mathbf{x}^k = (\delta \phi_0^k \dots \delta \phi_n^k \ \delta \eta_0^k \dots \delta \eta_n^k)$ en résolvant le système $\mathcal{J}(\mathbf{x}^k) \delta \mathbf{x}^k = -\mathcal{R}(\mathbf{x}^k)$ pour ensuite l'ajouter au précédent vecteur de solution : $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \delta \mathbf{x}^k$ où $\mathbf{x}^{k+1} = (\phi_0^k + \delta \phi_0^k \dots \phi_n^k + \delta \phi_n^k \ \eta_0^k + \delta \eta_0^k \dots \eta_n^k + \delta \eta_n^k)$ jusqu'à ce que la correction apportée soit suffisamment petite pour estimer que la solution est satisfaisante. On note que chaque ligne de \mathbf{x}_k correspond à la valeur de ϕ (ou η) au nœud du maillage correspondant.

5.2.4 Paramétrage de ε et D

Problèmes inhérents aux équations de Cahn-Hilliard

Il a été montré précédemment que les équations de Cahn-Hilliard conservaient la masse globalement selon l'équation (2.45). Cependant, cela n'implique pas que la masse soit conservée localement si l'interface qui sépare les fluides n'est pas suffisamment fine. Ceci signifie qu'une des phases pourrait perdre de la masse en diffusant dans l'autre.

Un exemple frappant est le rétrécissement spontané d'une bulle (ou d'une gouttelette) décrit dans l'article éponyme de Yue et al. [61]. Essentiellement, si l'on considère une goutte de fluide 1 plongée dans un autre fluide 0, alors les équations de Cahn-Hilliard *permettent* à la phase 1 de diffuser entièrement dans la phase 0 si cela permet de minimiser l'énergie libre du système. Ceci est «parfaitement acceptable dans le contexte de Cahn-Hilliard mais violerait la conservation de la masse de la gouttelette dans le contexte physique» comme affirmé dans ce même article. On a reproduit ce phénomène en considérant un système constitué d'une petite bulle d'un fluide (fluide 1) entouré d'un autre fluide (fluide 0) que l'on a simulé sur un intervalle de temps de 1s. La Figure 5.1 représente ces résultats. On rappelle ci-dessous les définitions des différentes *énergies*, qui ont ici la dimension de l'inverse d'une longueur au carré.

- Énergie de volume : $\frac{(1-\phi^2)^2}{4\varepsilon^2}$
- Énergie interfaciale : $\frac{1}{2}|\nabla\phi|^2$
- Énergie totale : Énergie de volume + Énergie interfaciale

Même si ces termes ne sont pas homogènes à des énergies, ils permettent une étude qualitative des phénomènes. On note que pour le moment, on ne résout que le système de Cahn-Hilliard, aussi on ne se soucie pas des propriétés physiques de chaque fluide, à l'exception de la tension de surface, fixée arbitrairement à 1 N.m^{-1} . Comme on le voit, la présence de l'interface est désavantageuse d'un point de vue énergétique, ce qui provoque sa disparition. Le mécanisme de transfert d'énergie est un transport diffusif de matière d'une fluide à l'autre. Heureusement, ce phénomène peut être limité par un choix adéquat des paramètres du système, à savoir ε , et la coefficient de mobilité D .

Paramétrage de ε

Comme on l'a vu dans la revue de littérature dans l'équation (2.37), le paramètre ε est relié à l'épaisseur de l'interface entre les deux phases. Lorsque l'on résout un problème numérique, on choisit le niveau de raffinement du maillage que l'on utilise, ainsi l'on voudrait que ε soit proportionnel d'une certaine manière à la taille caractéristique d'une cellule du maillage, que

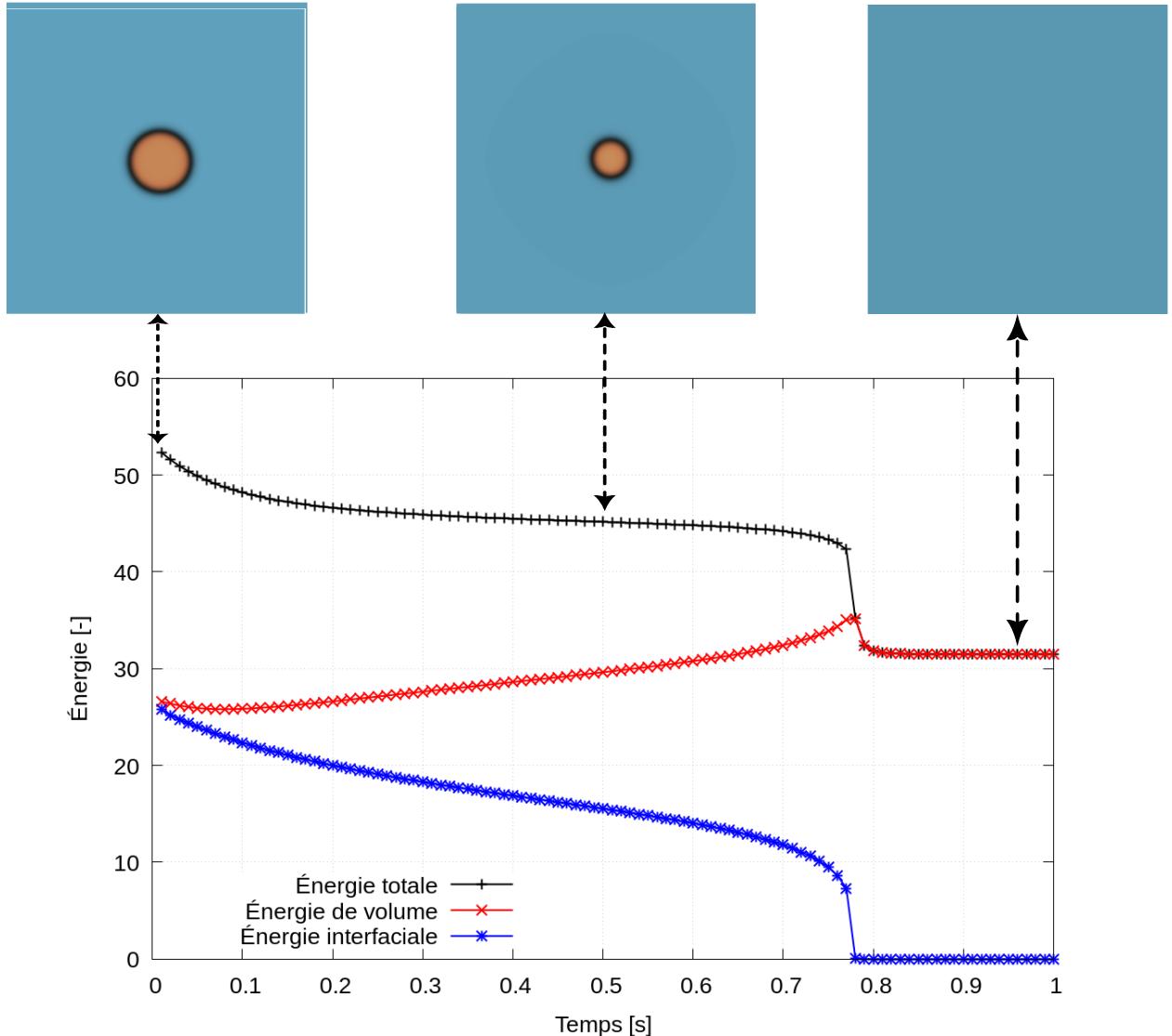


FIGURE 5.1 Rétrécissement d'une bulle (orange) par diffusion dans le fluide environnant (bleu), représenté à plusieurs temps et comparaison des différents états de la bulle avec l'énergie libre totale du système. L'énergie libre totale a diminué entre le début et la fin de la simulation, ce qui est acceptable du point de vue énergétique mais inacceptable du point de vue de la conservation locale de la masse.

l'on note h dans toute la suite de ce mémoire. En effet, si l'on raffine le maillage, on s'attend à ce que l'interface soit plus fine. On ne sait cependant pas a priori quelle doit être la relation entre ε et h , si ce n'est $\varepsilon \propto h$.

Afin de tirer des conclusions pouvant être appliquées à différents problèmes, on introduit le

nombre de Cahn, noté Cn . Il s'agit d'un nombre sans dimension et définit comme :

$$Cn = \frac{\varepsilon}{l} \quad (5.15)$$

où l est la plus petite longueur d'intérêt du système étudié selon l'interprétation de Yue et al. [61]. Afin que les problèmes soient correctement résolus, la condition $Cn \ll 1$, et plus précisément $Cn \lesssim 0.01$, est suffisante en général, d'après les mêmes auteurs. En outre, Liu et al. [62] donnent une limite inférieure aux valeurs de ε possibles :

$$h \leq \frac{\varepsilon}{\sqrt{2.5}} \quad \text{pour un problème 2D} \quad (5.16)$$

$$h \leq \varepsilon \quad \text{pour un problème 3D} \quad (5.17)$$

Dans la suite, si l'on considère des maillages uniformes, alors on prendra $\varepsilon = D_h$ où D_h est le diamètre du cercle circonscrit à une cellule du maillage. En 2D, on a alors $\varepsilon = \sqrt{2}h$ et en 3D, $\varepsilon = \sqrt{3}h$. Ainsi le critère est respecté pour toutes nos simulations.

L'épaisseur d'interface est aussi intimement reliée au problème de rétrécissement constaté dans la section précédente. Pour les relier, on introduit la notion de rayon critique, noté r_C , telle que définie par Yue et al. [61] dans le contexte du rétrécissement d'une bulle, mais dont les implications se généralisent à des cas non-sphériques. Les bulles dont le rayon est inférieur à r_C seront invariablement vouées à disparaître en diffusant dans l'autre fluide. La rayon critique s'exprime ainsi :

$$r_C = \begin{cases} \left(\frac{\sqrt{6}}{8\pi} V \varepsilon\right)^{1/3} & \text{en 2D} \\ \left(\frac{2^{1/6}}{3\pi} V \varepsilon\right)^{1/4} & \text{en 3D} \end{cases} \quad (5.18)$$

où V désigne le volume total du système. On veut donc que r_C soit le plus petit possible pour éviter toute diffusion non-physique d'une phase dans une autre. Cette tâche est néanmoins ardue à cause des puissances $1/3$ et $1/4$, ainsi, même si l'on diminue epsilon significativement. le rayon critique ne sera pas tant affecté. Si l'on divise ε par 100, le rayon critique ne sera divisé que par 4.6 en 2D et 3.16 en 3D. Il faut donc s'assurer que l'écart de taille entre le système entier et la bulle (ou le fluide d'intérêt) ne soit pas démesuré.

Paramétrage du coefficient de mobilité (D)

Le coefficient de mobilité est relié à l'échelle de temps du système de Cahn-Hilliard. Plus D est grand, plus le système évoluera rapidement vers son état d'équilibre (voir (2.34)). Mais

l'état d'équilibre des équations de Cahn-Hilliard est justement ce que l'on veut éviter pour s'assurer de la conservation de la masse dans nos simulations. On a vu précédemment que le rayon critique donnait une échelle au dessous de laquelle il n'est pas possible de faire des simulations sans que les phases d'intérêt ne disparaissent. Cette limite peut-être contournée en considérant l'échelle de temps du problème que l'on souhaite résoudre. En effet, le processus de rétrécissement par diffusion n'est pas immédiat, et il est possible de contrôler le temps qu'il prend. Ainsi, on peut faire en sorte que le temps simulé soit très petit devant le temps caractéristique de diffusion et minimiser la perte de masse. Là encore, Yue et al. [61] donnent une échelle de temps caractéristique qu'ils notent t_{sh} dont l'expression est :

$$t_{sh} = 100 \frac{r_0 \Delta r \varepsilon}{D \sigma} \quad (5.19)$$

où r_0 est le rayon initial de la bulle, δr est la variation (négative) de rayon de la bulle pendant le temps t_{sh} , σ le coefficient de tension de surface et D le coefficient de mobilité. Si l'on connaît le temps de simulation de notre problème, noté t_{sim} , alors une bonne pratique est de prendre $t_{sim} \ll t_{sh}$, soit $t_{sim} \lesssim 10t_{sh}$. Idéalement Δr devrait être le plus petit possible, une implémentation raisonnable est de prendre $\Delta r = \frac{r_0}{100}$, donc n'admettre que 1% de variation du rayon au cours de la simulation. ε , r_0 et σ sont des données du problème, ainsi il ne reste qu'à inverser la relation pour déterminer le coefficient de mobilité :

$$D = \frac{r_0^2 \varepsilon}{10t_{sim} \sigma} \quad (5.20)$$

Si l'on revient à la simulation présentée au dessus (Figure 5.1), le temps de rétrécissement caractéristique est d'environ une seconde. Ainsi, si on lance la même simulation avec un coefficient de mobilité 100 fois plus petit, on observe en effet (Figure 5.2) que la bulle a très peu diffusé dans le fluide environnant et que l'énergie libre du système décroît toujours, mais à un rythme beaucoup plus modéré que dans le cas précédent.

Pour les systèmes physiques pour lesquels la diffusion d'une phase dans l'autre n'est pas un problème, si les phases sont en proportions similaires par exemple, Jacqmin [63] propose que le coefficient de mobilité soit relié à l'interface comme suit : $D \propto \varepsilon^n$ où $n \in [1, 2]$. Ceci donne un ordre de grandeur du coefficient de mobilité, mais pas de valeur précise à fixer selon le problème rencontré. Ainsi il faut souvent tâtonner pour trouver la bonne valeur de mobilité.

On note que les paramétrages dérivés précédemment ne sont pas valables si l'interface se déplace à une vitesse importante. Un tel cas sera rencontré dans l'exemple de décollement de bulle présenté au chapitre suivant. Le paramétrage spécifique au problème sera expliqué dans l'introduction de l'exemple.

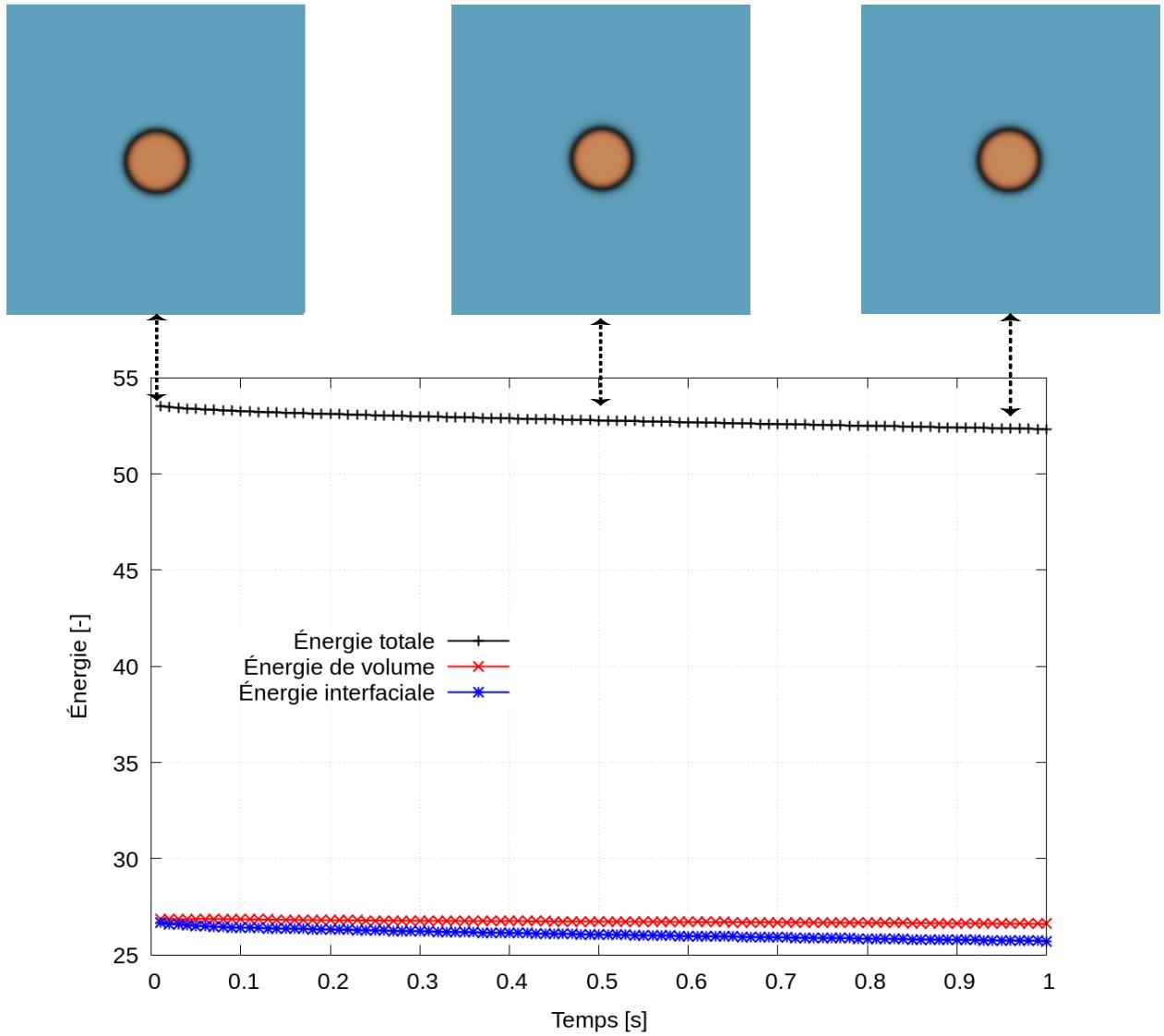


FIGURE 5.2 Simulation du rétrécissement d'une bulle (fluide 1 en orange) par diffusion dans le fluide environnant (fluide 0 en bleu), représenté à plusieurs temps et comparaison des différents états de la bulle avec l'énergie libre totale du système. En divisant le coefficient de mobilité par 100, on ralentit considérablement la diffusion de la bulle, sans pour autant l'arrêter puisque l'énergie totale décroît.

5.3 Vérification : méthode des solutions manufacturées

Lorsque l'on souhaite simuler un problème physique, le point de départ est un ensemble d'équations dotées de termes sources avec certaines conditions aux frontières. On regarde ensuite la solution trouvée et on tire des conclusions. Mais comment savoir si la solution trouvée est la bonne ? En espérant que le modèle simulé est fidèle à la réalité, les erreurs restantes peuvent provenir d'erreurs de discrétisation et d'erreurs de programmation dans

l'implémentation du modèle . L'objectif de cette partie est précisément de vérifier qu'il n'y a pas eu d'erreur dans l'implémentation, en employant la Méthode des Solutions Manufacturées (MSM) (voir chapitre 1.5 de la référence [17]).

Cette fois-ci, on imagine une solution fictive (en général un produit de fonctions suffisamment continues, par exemple sinus et cosinus) que l'on injecte dans le système d'équations dont on souhaite vérifier l'implémentation. Cette première étape permet d'obtenir les termes sources et les conditions aux frontières. Ensuite, on lance une simulation avec comme seule information les termes sources et les conditions aux frontières précédemment déterminées. Finalement, on compare la solution numérique obtenue à la solution analytique en faisant varier la discrétisation employée. Ceci permet de vérifier que les schémas implémentés convergent bien aux ordres théoriques prévus et que le code est capable de retrouver des solutions artificielles uniquement à l'aide de termes sources et de conditions aux frontières. Cette étape ne permet pas de valider le modèle puisque l'on a jamais comparé des résultats numériques à des résultats issus de l'expérience, mais au moins de vérifier le code et son implémentation.

On ne s'intéresse qu'à une solution stationnaire du champ de phase car le potentiel chimique est entièrement déterminé par la forme du champ de phase. Soit $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ le domaine de calcul 2D ϕ_{MMS} la solution manufacturée sur Ω :

$$\phi_{MMS}(x, y) = \sin(\pi x) \sin(\pi y) \quad (5.21)$$

On injecte cette forme dans l'équation du potentiel chimique :

$$\eta - \frac{\lambda}{\varepsilon^2} (\sin^3(\pi x) \sin^3(\pi y) - \sin(\pi x) \sin(\pi y)) + \lambda \nabla^2 (\sin(\pi x) \sin(\pi y)) = S_{mms}(x, y) \quad (5.22)$$

où $S_{mms}(x, y)$ est le terme source que l'on cherche à déterminer. Pour simplifier, on prend $\varepsilon = 1$ et $\sigma = 1$. Ainsi, $\lambda = \frac{3}{2\sqrt{2}}$. Après calcul, on obtient :

$$S_{mms}(x, y) = \frac{3}{2\sqrt{2}} \left((\sin(\pi x) \sin(\pi y) - \sin^3(\pi x) \sin^3(\pi y)) - 2\pi^2 \sin(\pi x) \sin(\pi y) \right) \quad (5.23)$$

On lance les simulations en utilisant des polynômes d'interpolation de degré $d = 1$, $d = 2$ et $d = 3$ puis, pour étudier la convergence, on calcule l'erreur L^2 entre la solution numérique et la solution manufacturée pour des Δx décroissants. On s'attend à un ordre de convergence, noté p , tel que $p = 1 + d$. On obtient alors les graphiques d'erreur représentés à la Figure 5.3. Les traits pointillés représentent les pentes d'erreur théoriques et les erreurs calculées sont les marqueurs. On donne le calcul de la pente des courbes en pointillé, en notant e l'erreur. Puisqu'on sera amené à faire des simulations 3D, on peut considérer un nouveau domaine $\Omega =$

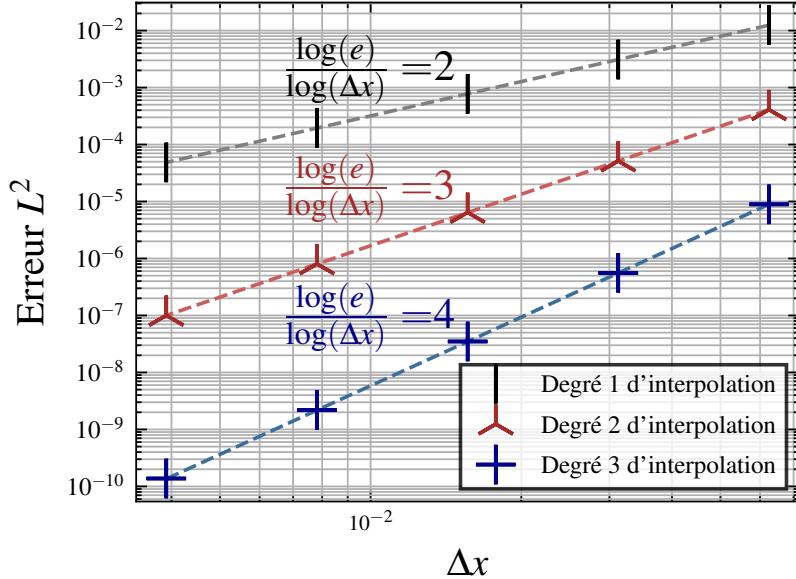


FIGURE 5.3 Évolution de l'erreur L^2 sur ϕ en fonction du pas d'espace Δx pour différents degrés de polynômes d'interpolation dans un domaine 2D. La comparaison avec l'ordre théorique de convergence (en pointillés) montre que le schéma numérique converge aux ordres souhaités.

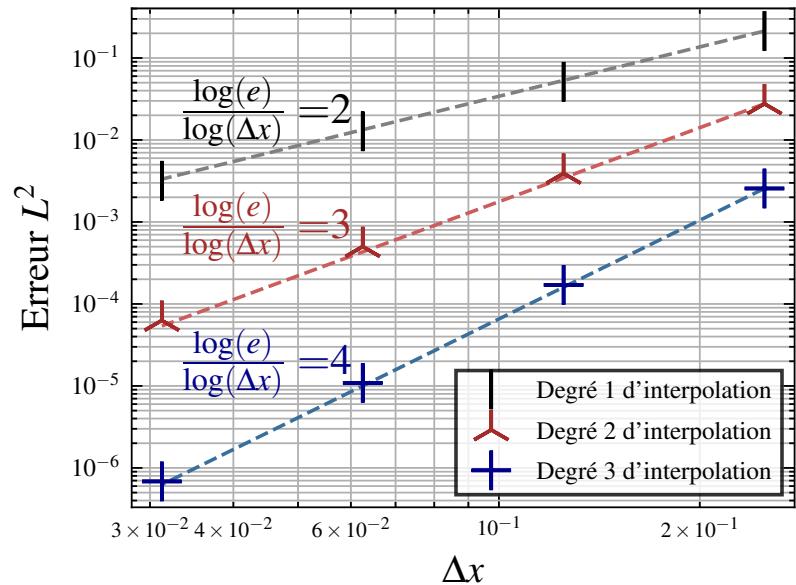


FIGURE 5.4 Évolution de l'erreur L^2 sur ϕ en fonction du pas d'espace Δx pour différents degrés de polynômes d'interpolation dans un domaine 3D. La comparaison avec l'ordre théorique de convergence (en pointillés) montre que le schéma numérique converge aux ordres souhaités.

$[-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$ avec la solution manufacturée $\phi_{mms}(x, y, z) = \sin(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\pi z)$. En suivant les même étapes que pour la MSM 2D, on obtient les graphiques d'erreur (Figure 5.4) qui montrent que l'on converge aussi bien en 2D qu'en 3D.

5.4 Décomposition spinodale

La décomposition spinodale est un mécanisme physique par lequel *une phase thermodynamique seule se sépare spontanément en deux phases distinctes* (traduit de [64]). Ce phénomène apparaît par exemple lors du refroidissement d'une mixture liquide de métaux : en dessous d'une certaine température, il est plus favorable (énergétiquement parlant) que les phases constituant la mixture se séparent. On observe alors la formation de zones riches d'un certain métal et pauvre de l'autre qui tendent à se rassembler à long terme, pour ne donner que deux zones distinctes chacune riche d'un métal. Cette simulation vise vérifier que le modèle qui a été créé pour décrire la décomposition spinodale est capable de simuler adéquatement ledit phénomène.

On considère un domaine carré 2D $\Omega = [-2.5, 2.5] \times [-2.5, 2.5]$ dans lequel on considère une mixture extrêmement hétérogène de fluides. Pour obtenir cet aspect hétérogène du mélange, on initialise le champ de phase comme suit : $\phi_0(x, y) = 2a - 1$ où a suit une loi uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$, ce qui assure que ϕ_0 est bien à valeurs dans $[-1, 1]$. On considère un coefficient de mobilité $D = 10 \text{ m}^3 \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, un coefficient de tension de surface $\sigma = 10 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$. On raffine uniformément 7 fois le domaine, ce qui donne un pas d'espace $\Delta x = 3.91 \cdot 10^{-2} \text{ m}$. Pour cette taille de maillage, on obtient une épaisseur d'interface $\varepsilon = 5.52 \cdot 10^{-2} \text{ m}$. Le temps de simulation considéré est $t_f = 10^{-3} \text{ s}$, on prend un pas de temps $\Delta t = 5 \cdot 10^{-6} \text{ s}$ et on prend un schéma en temps d'ordre 2 (**bdf2**).

On représente les valeurs du champ de phase au cours du temps à la Figure 5.5. Un filtre *Warp by scalar* a été appliqué pour mieux visualiser la séparation des phases. La décomposition est très rapide au début de la simulation et ralentit petit à petit car les différences de potentiel chimique, qui animent le mouvement des phases, décroissent avec le temps. Ceci est cohérent avec l'évolution de l'énergie du système pendant la simulation, représentée à la Figure 5.6. En ne tenant pas compte du premier point qui est dû à l'initialisation, on voit que toute l'énergie du système est de l'énergie interfaciale qui décroît progressivement tandis que l'énergie de volume augmente. Cette évolution correspond à la formation de zones distinctes riches en phase 1 ou 0.

Les équations de Cahn-Hilliard seules sont intéressantes, mais leur application est limitée à des cas simples ou trop éloignés des problèmes d'écoulements polyphasiques que l'on souhaite

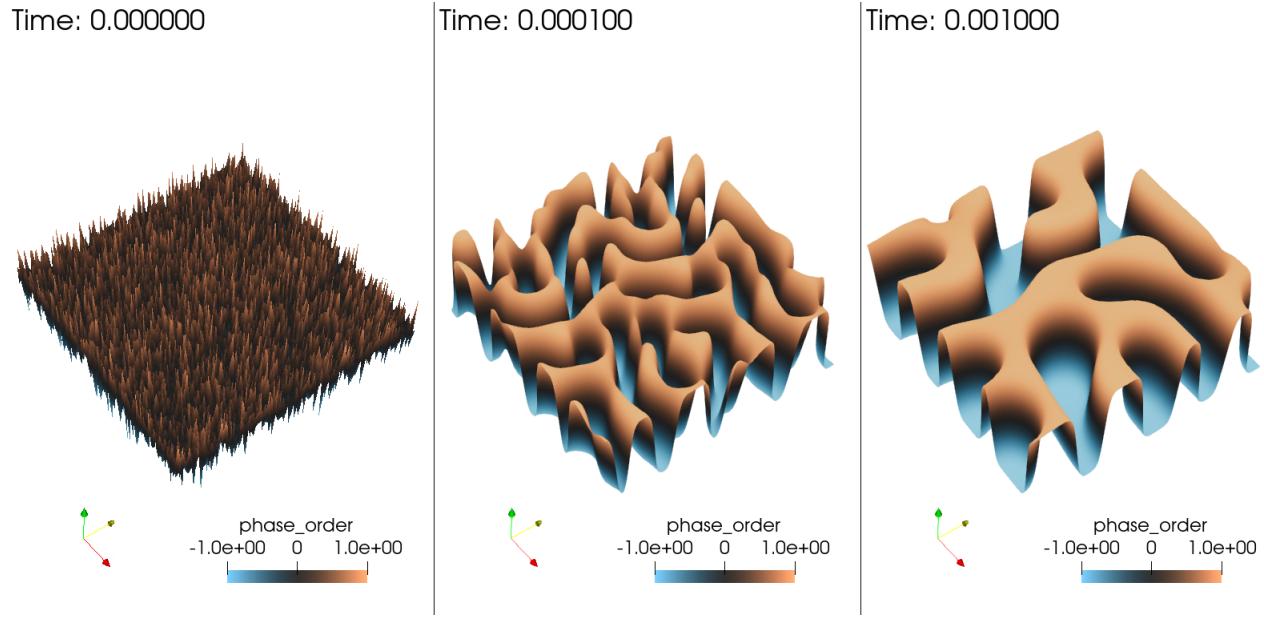


FIGURE 5.5 Représentation du phénomène de décomposition spinodale à différents temps (unité : s), de gauche à droite : $t = 0$ s, $t = 0.1t_f$ et $t = t_f$. Les phases tendent à s'agglomérer pour former des amas de plus en plus gros afin de minimiser l'énergie d'interface.

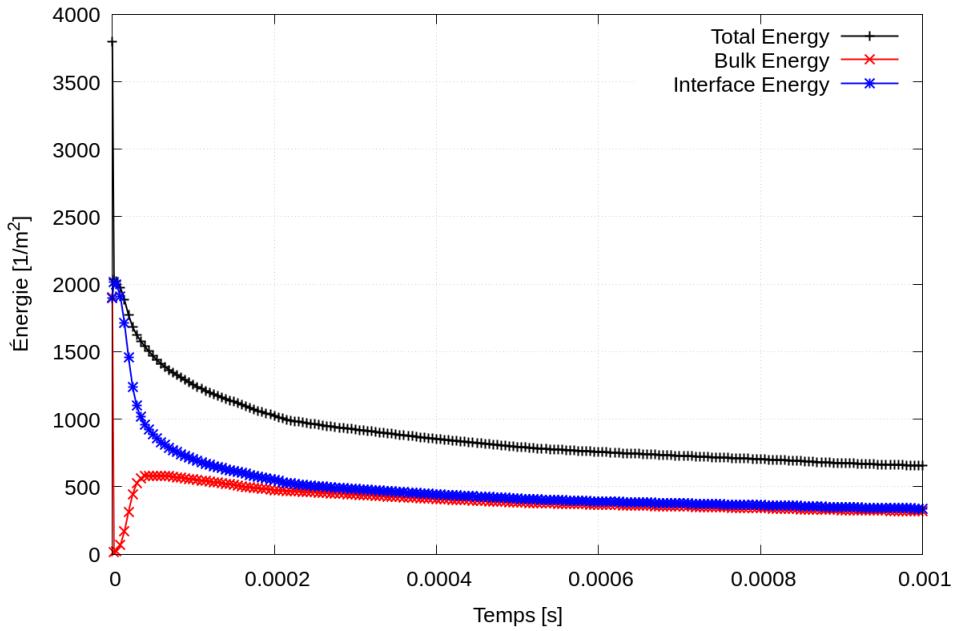


FIGURE 5.6 Évolution des énergies du système au cours du temps. On observe une forte variation pendant les premiers pas de temps car le système est très hétérogène, leur énergie d'interface est donc élevée et les phases se séparent spontanément. Au temps long, les énergies de volume et interfaciale tendent à équilibrer leur contribution.

simuler. Aussi après avoir montré que le solveur Cahn-Hilliard était bien implémenté grâce à la méthode des solutions manufacturées et qu'il permettait d'obtenir des résultats qualitativement satisfaisant sur un problème typique, il est temps de coupler le système d'équations avec les équations de Navier-Stokes, et de faire nos premières simulations couplées !

CHAPITRE 6 MODÈLE DE CAHN-HILLIARD-NAVIER-STOKES

Dans cette partie, on se propose d'implémenter le couplage entre les équations de Cahn-Hilliard et les équations de Navier-Stokes puis de les tester sur différents cas de *benchmark*. On rappellera d'abord les équations avant d'écrire leur forme faible. Suivront ensuite les nombreux cas tests simulés pour vérifier les performances du solveur. Finalement, un cas industriel sera simulé au complet pour lequel on procédera à un balayage paramétrique sur des propriétés physiques d'intérêt qui sera précédé d'une analyse de convergence de maillage.

6.1 Rappel des équations

Dans cette partie, on rappelle le système d'équations couplé de Cahn-Hilliard-Navier-Stokes sur un domaine Ω de frontière Γ . On considère un écoulement incompressible, sans considérer les conditions aux frontières, les équations s'écrivent :

$$\begin{cases} \rho(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) + \left(\frac{\rho_0 - \rho_1}{2} M(\phi) \nabla \eta \cdot \nabla \right) \mathbf{u} - \nabla \cdot (\mu(\phi) (\nabla \mathbf{u})) + \nabla \hat{p} - \eta \nabla \phi = 0 & \text{sur } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 & \text{sur } \Omega \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (D \nabla \eta) = 0 & \text{sur } \Omega \\ \eta - \lambda \frac{(\phi^3 - \phi)}{\varepsilon^2} + \lambda \nabla^2 \phi = 0 & \text{sur } \Omega \end{cases} \quad (6.1)$$

où \hat{p} a été défini dans la revue de littérature, à la sous-section 2.6.1. Les propriétés physiques $\rho(\phi)$ et $\mu(\phi)$ sont déterminées comme suit :

$$\rho(\phi) = \frac{1 + \phi}{2} \rho_0 + \frac{1 - \phi}{2} \rho_1 \quad (6.2)$$

$$\mu(\phi) = \frac{1 + \phi}{2} \mu_0 + \frac{1 - \phi}{2} \mu_1 \quad (6.3)$$

Ainsi, si $\phi = 1$, alors on se trouve dans le fluide 0 et si $\phi = -1$, alors on se trouve dans le fluide 1.

Les conditions aux frontières ayant déjà été évoquées pour les équations de Cahn-Hilliard dans la section précédente, on ne décrit que les conditions aux frontières des équations de Navier-Stokes.

- Condition *do nothing* : on impose rien de spécifique à la paroi, ce qui revient à prendre une contrainte nulle : $\mu(\phi) \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - p_{\underline{\mathbf{I}}} \cdot \mathbf{n} = 0$
- Condition de non-glissement (*no-slip*) : la différence de vitesse entre le fluide et la

paroi est nulle. En général, la paroi de se déplace pas, cela impose donc une vitesse nulle à la paroi.

- Champ de vitesse imposé : on peut imposer un champ de vitesse dépendant de l'espace à une paroi, ce qui est utile pour créer des entrées de fluide par exemple.
- Condition de glissement (*slip*) : la composante normale de la vitesse par rapport à la paroi est nulle : $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$. La composante tangentielle est laissée libre.
- Condition de sortie (*outlet*) : cette condition a été introduite par Arndt et al. [65]. Elle permet de laisser du fluide sortir du domaine tout en empêchant sa ré-entrée avec un terme de pénalisation. Formellement, la condition est :

$$\mu(\phi) \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - p \underline{\mathbf{I}} \cdot \mathbf{n} - \beta \min(0, \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{u} = 0 \quad (6.4)$$

6.2 Résolution numérique des équations

6.2.1 Stratégie de couplage

Pour résoudre le système d'équations (6.1), on pourrait faire comme dans le chapitre précédent et résoudre le système d'équations *d'un coup* et mettre en place un solveur monolithique. On va cependant mettre en place une stratégie de couplage différent pour profiter de la structure de Lethe qui est centrée sur la résolution des équations de Navier-Stokes. Plutôt que de résoudre le système d'équation entier et déterminer les inconnues de vitesse \mathbf{u} , pression p , champ de phase ϕ et potentiel chimique η , on scinde le système en deux. On initialise tout d'abord tous les champs puis on résout les équations de Cahn-Hilliard pour déterminer ϕ et η en utilisant la valeur initiale du champ de vitesse dans le terme d'advection. Ensuite, on résout les équations de Navier-Stokes en tenant compte des termes de tension de surface, de flux relatif diffusif et de la dépendance des propriétés physiques au champ de phase, grâce aux valeurs précédemment déterminées. Ceci nous donne les champs de pression et de vitesse qui sont ensuite injectés dans le système de Cahn-Hilliard, que l'on résout, et ainsi de suite. On résout chaque système indépendamment en utilisant la méthode des éléments finis. La forme faible des équations de Cahn-Hilliard a déjà été écrite dans le chapitre précédent, ainsi on ne présente que la résolution des équations de Navier-Stokes dans la suite de cette section.

6.2.2 Formulation faible du problème

La vitesse est vectorielle, cela revient à résoudre les équations de Navier-Stokes pour quatre champs scalaires différents (en 3D, et seulement trois champ scalaires en 2D), trois pour les composantes de la vitesse et une pour le champ de pression. Pour l'écriture de la forme faible,

on considère $\mathbf{v} \in (H^1(\Omega) \times [0, T])^3$ et $q \in L^2(\Omega) \times [0, T]$ les fonctions test respectivement associées à la vitesse et à la pression. On prend le produit scalaire de l'équation de la quantité de mouvement par \mathbf{v} , qui est un vecteur, et on multiplie la conservation de la masse par q , puis on intègre sur Ω :

$$\int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \left(\rho(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{f}_V \right) + \left(\frac{\rho_0 - \rho_1}{2} M(\phi) \nabla \eta \right) \cdot \nabla \mathbf{u} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot (-\nabla \cdot (\mu(\phi) (\nabla \mathbf{u})) + \nabla \hat{p} - \eta \nabla \phi) d\Omega = 0 \quad (6.5)$$

$$\int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} d\Omega = 0 \quad (6.6)$$

On intègre par partie les termes de pression et de viscosité :

$$\int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \left(\rho(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{f}_V \right) + \left(\frac{\rho_0 - \rho_1}{2} M(\phi) \nabla \eta \right) \cdot \nabla \mathbf{u} - \eta \nabla \phi \right) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : (\mu(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) - \hat{p} \nabla \cdot \mathbf{v} d\Omega = 0 \quad (6.7)$$

$$\int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} d\Omega = 0 \quad (6.8)$$

où l'on a supposé qu'il n'y avait pas de conditions aux frontières spécifiques appliquées sur Γ . C'est à dire que l'on prend :

$$\int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot (\mu(\phi) \nabla \mathbf{u} + \underline{\mathbf{I}} \hat{p}) \cdot \mathbf{n} d\Gamma = 0 \quad (6.9)$$

6.2.3 Résolution du problème

Dans cette partie, on suit les mêmes étapes que dans les parties 5.2.2 et 5.2.3, seuls la forme des équations diffère. Ainsi, on écrit directement le résiduel ;

$$\mathcal{R}_{i,k}^{n+1} = \int_{\Omega} \mathbf{v}_i \cdot \left(\rho(\phi^{n+1}) \left(\gamma_0 \mathbf{u}_k^{n+1} + \sum_{i=1}^p \gamma_i \mathbf{u}^{n+1-i} + (\mathbf{u}_k^{n+1} \cdot \nabla) \mathbf{u}_k^{n+1} + \mathbf{f}_V - \eta^{n+1} \nabla \phi^{n+1} \right) \right) \quad (6.10)$$

$$\begin{aligned} & + \int_{\Omega} \mathbf{v}_i \cdot \left(\left(\frac{\rho_0 - \rho_1}{2} M(\phi^{n+1}) \nabla \eta^{n+1} \right) \cdot \nabla \mathbf{u}_k^{n+1} \right) d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v}_i^T : \left(\mu(\phi^{n+1}) ((\nabla \mathbf{u}_k^{n+1})^T) \right) - \hat{p}_k^{n+1} \nabla \cdot \mathbf{v}_i + q_i \nabla \cdot \mathbf{u}_k^{n+1} d\Omega \end{aligned} \quad (6.11)$$

où les ϕ^{n+1} et η^{n+1} sont connus car on a résolu le système d'équations de Cahn-Hilliard auparavant. De plus, $\gamma_0 = 1$, ce qui simplifie légèrement l'écriture. On écrit ensuite la matrice jacobienne (on note qu'on ne différencie que par rapport à \mathbf{u} et \hat{p}) :

$$\mathcal{J}_{ij,k}^{n+1} = \int_{\Omega} \mathbf{v}_i \cdot \left(\rho(\phi^{n+1}) \left(\mathbf{v}_j + (\mathbf{u}_k^{n+1} \cdot \nabla) \mathbf{v}_j + (\mathbf{v}_j \cdot \nabla) \mathbf{u}_k^{n+1} \right) \right) \quad (6.12)$$

$$\begin{aligned} & + \int_{\Omega} \mathbf{v}_i \cdot \left(\left(\frac{\rho_0 - \rho_1}{2} M(\phi^{n+1}) \nabla \eta^{n+1} \right) \cdot \nabla \mathbf{v}_j \right) d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v}_i^T : \left(\mu(\phi^{n+1}) (\nabla \mathbf{v}_j^T) \right) - q_j \nabla \cdot \mathbf{v}_i + q_i \nabla \cdot \mathbf{v}_j d\Omega \end{aligned} \quad (6.13)$$

où l'on a utilisé les formes discrétisées de \mathbf{u} et \hat{p} :

$$\mathbf{u} \approx \sum_j u_j \mathbf{v}_j \quad (6.14)$$

$$\hat{p} \approx \sum_j \hat{p}_j q_j \quad (6.15)$$

6.2.4 Stabilisation des équations de Navier-Stokes

La résolution des équations de Navier-Stokes nécessite des méthodes de stabilisation afin de pallier deux problèmes indésirables rencontrés en appliquant la méthode de Galerkine. Tout d'abord, la condition inf-sup LBB contraint d'utiliser des éléments qui sont *LBB-conformes*. Dans notre cas, cela impose un degré d'interpolation de vitesse strictement plus élevé que le degré d'interpolation de la pression, ce qui n'est pas idéal car plus coûteux en calcul. De plus, pour des problèmes dominés par l'advection, le système linéaire devient mal posé, ce qui engendre des oscillations numériques non-physiques. Pour relaxer la contrainte LBB et réduire les oscillations, on introduit deux termes de stabilisation, basés sur la stabilisation Streamline-Upwind Petrov-Galerkin (SUPG) et Pressure-Stabilizing Petrov-Galerkin (PSPG) [66].

6.3 Simulation de cas classiques

Dans cette partie, on teste étape par étape les performances du solveur Cahn-Hilliard-Navier-Stokes dont on a détaillé l'implémentation dans la partie précédente. L'idée de cette partie est de résoudre des problèmes de *benchmark* classiques qui permettent d'isoler des mécanismes physiques essentiels. Il faut que ces mécanismes physiques soient reproduits fidèlement pour que les résultats des simulations pour des cas plus complexes soient dignes de confiance. Ce processus itératif commence doucement, on cherchera d'abord à savoir si l'on peut retrouver le saut de pression dans une bulle décrit par la loi de Laplace, ensuite on testera un cas en présence d'un champ gravitationnel, pour une interface simple d'abord puis plus complexe en simulant d'abord une rupture de digue puis une instabilité de Rayleigh-Taylor. La rupture de digue permettra d'ailleurs d'utiliser à notre avantage l'adaptation de maillage. Nous vérifierons ensuite que la force de tension de surface est simulée adéquatement avec deux cas d'oscillation de bulles : un cas de petites oscillations et un cas de grandes oscillations. Les effets visqueux seront plus visibles dans le deuxième cas. Puis, un cas de montée capillaire dans un tuyau permettra de démontrer l'implémentation des angles de contact et de retrouver les résultats analytiques donnés par la loi de Jurin. Finalement, un cas plus complexe sera ensuite simulé consistant en la montée d'une bulle par poussée d'Archimède dans une colonne d'eau.

Par ailleurs, la plupart des cas seront comparés à des résultats de la littérature : expérimentaux s'ils existent ou au moins numériques. Pour les résultats numériques, on se basera surtout sur les résultats du solveur VOF implémenté dans Lethe qui est bien établi et dont beaucoup de résultats ont été vérifiés avec succès. Ceci nous permettra de tirer des conclusions sur les avantages (ou inconvénients) à utiliser le solveur Cahn-Hilliard-Navier-Stokes plutôt que le solveur VOF.

Dans tous les cas présentés dans la suite, on considère (sauf mention explicite du contraire) les unités fondamentales suivantes :

- Unité de temps : $[T] = \text{s}$
- Unité de masse : $[M] = \text{kg}$
- Unité de longueur : $[L] = \text{m}$

Les grandeurs dérivées de ces unités seront aussi écrites avec cette convention. Par exemple une force sera exprimée en Newton : $[N] = \text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-2}$. De plus, l'ordre d'interpolation est égal à 1, sauf mention du contraire, pour toutes les inconnues ($\mathbf{u}, p, \phi, \eta$).

6.3.1 Bulle statique, saut de pression et courants parasites en 2D

Dans ce premier cas, on s'intéresse à retrouver le saut de pression dans une bulle de rayon R , décrit par la loi de Young-Laplace [67] :

$$\Delta p = \sigma \kappa \quad (6.16)$$

où $\Delta p = p_{\text{int}} - p_{\text{ext}}$, la différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur de la bulle, σ est le coefficient de tension de surface et κ est la courbure. En deux dimensions, on a $\kappa = \frac{1}{R}$. Ce problème est aussi un cas typique pour étudier les vitesses parasites à l'interface entre les fluides et est basé sur le travail de Zahedi et al. [8]. Puisque l'on sait que le champ de vitesse doit être nul à l'équilibre, on peut avoir une idée de l'ordre de grandeur des courants parasites, et vérifier qu'ils disparaissent lorsqu'on utilise un maillage suffisamment raffiné. Pour ce faire, on considère tout d'abord un domaine $\Omega = [-2.5, 2.5] \times [-2.5, 2.5]$ au centre duquel on place une bulle de rayon $R \in \{0.15, 0.20, 0.25, 0.30, 0.4\}$ (fluide 1) entouré d'un fluide 0, voir la Figure 6.1. Les propriétés physiques de chaque fluide sont identiques : $\rho_0 = \rho_1 = 10$ et $\nu_0 = \nu_1 = 0.1$ et on prend $\sigma = 1$ comme coefficient de tension de surface. On néglige les forces de gravité. Finalement, on simule jusqu'au temps final $t_f = 1.5$.

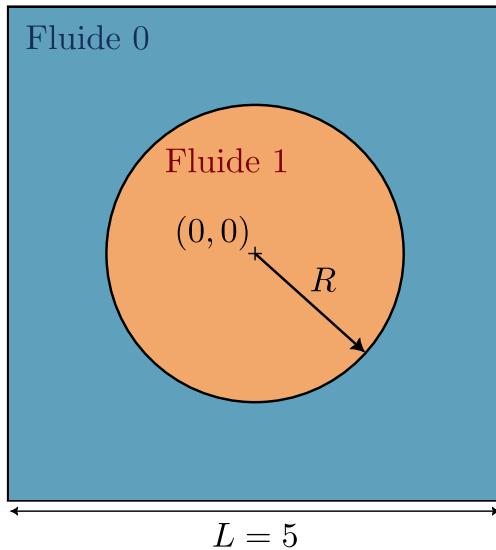


FIGURE 6.1 Représentation schématique du système physique de la simulation de la bulle statique

Le domaine est maillé en raffinant uniformément chaque longueur 9 fois, ce qui donne un pas d'espace $\Delta x = 9.78 \times 10^{-3}$, un pas de temps constant $\Delta t = 0.05$. On détermine l'épaisseur

d'interface et le coefficient de mobilité comme suit :

$$\varepsilon = \sqrt{2}\Delta x = 1.38 \times 10^{-2} \quad (6.17)$$

On calcule le rayon critique r_C :

$$r_C = \left(\frac{\sqrt{6}}{8\pi} V \varepsilon \right)^{1/3} = 0.45 \quad (6.18)$$

avec $V = 25$. Ainsi, toutes les bulles de l'exemple ont un rayon inférieur au rayon critique. Il est donc nécessaire de prendre une valeur de mobilité adaptée, selon l'équation (5.20). On remplace r_0 par les différentes valeurs de R de l'exemple et t_{sim} par t_f . On résume dans le tableau 6.1 les valeurs du coefficient de mobilité en fonction du rayon.

On considère des polynômes d'interpolation d'ordre 1 pour la pression, le champ de phase et le potentiel chimique et d'ordre 2 pour la vitesse. Une technique d'initialisation pour le champ de phase est d'injecter une solution analytique utilisant la fonction de tangente hyperbolique, puisque l'on a vu que c'était la solution analytique des équations de Cahn-Hilliard dans l'équation (2.36). Aussi, on prend l'expression suivante comme condition initiale pour le champ de phase :

$$\phi_0(x, y) = -\tanh\left(\frac{R - \sqrt{x^2 + y^2}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \quad (6.19)$$

On initialise le champ de potentiel chimique à $\eta(x, y) = 0$ dans tout le domaine. Pour les conditions aux frontières, on fixe la vitesse du fluide à 0 aux quatre parois du domaine (*no-slip*) et on prend des conditions de flux-nul pour la phase et le potentiel chimique. Afin de calculer la différence de pression, on prend la différence des moyennes de la pression à l'intérieur et à l'extérieur, que l'on compare à l'équation (6.16). Les résultats sont montrés à la Figure 6.2 pour différentes valeurs de R .

La Figure 6.2 montre un très bon accord entre la théorie et les résultats numériques obtenus. En outre, on peut voir à la Figure 6.3 que le champ de pression varie continûment dans l'espace sans dépassement ni sous-estimation à l'interface. Pour étudier les courants de vitesse parasites, on garde le même domaine Ω et les mêmes paramètres du problème, à l'exception

TABLEAU 6.1 Valeurs du coefficient de mobilité en fonction du rayon initial de la bulle

Rayon (R)	0.15	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40
Mobilité (D)	1.55×10^{-5}	2.76×10^{-5}	4.32×10^{-5}	6.21×10^{-5}	8.46×10^{-5}	1.10×10^{-4}

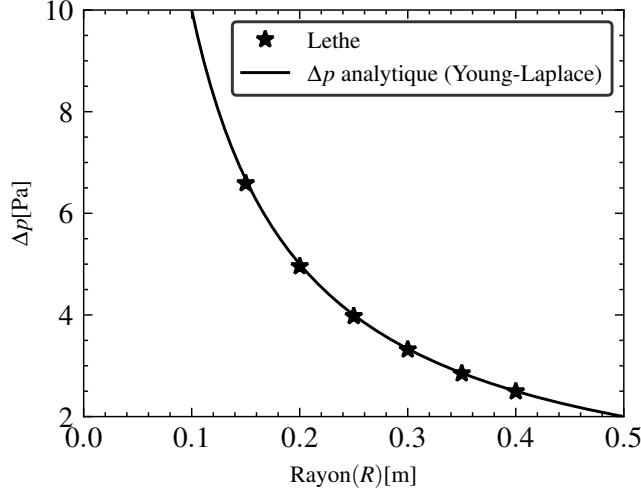


FIGURE 6.2 Comparaison du saut de pression entre les résultats numériques et la solution analytique pour le cas d'une bulle statique de rayon R

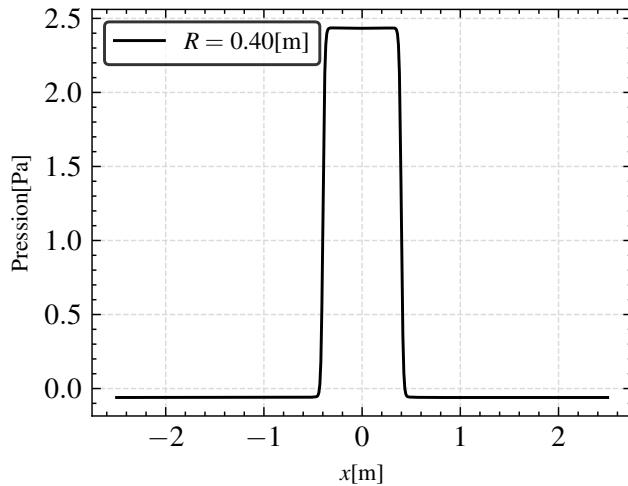


FIGURE 6.3 Représentation du champ de pression pour le cas $R = 0.4$ sur la droite $y = 0$. La variation de pression se fait continûment et sans discontinuité comme attendu d'une méthode diffuse

du niveau de raffinement du maillage. Aussi, on fixe le rayon à $R = 0.3$. Ce faisant, on calcule la norme L^2 du champ de vitesse au temps $t = t_f$ et on trace l'erreur en fonction du pas d'espace Δx , que l'on représente à la Figure 6.4. On observe une convergence entre un ordre 1 et un ordre 2 de l'erreur commise sur la vitesse, ce qui démontre bien que les courants de vitesse parasites disparaissent avec le raffinement du maillage.

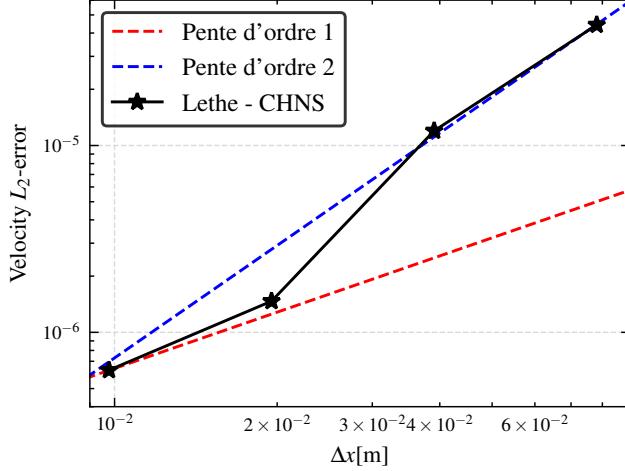


FIGURE 6.4 Évolution de l'erreur L^2 du champ de vitesse en fonction du pas d'espace Δx et comparaison à la pente d'ordre 2 théorique. On observe que la décroissance de l'erreur est entre les ordres 1 et 2.

6.3.2 Rupture de digue : action de la gravité sur une interface simple

On s'intéresse maintenant à l'action d'un champ de gravité sur le champ de phase en considérant un cas de rupture de digue qui reproduit l'expérience faite par Martin et al. [68] La quantité d'intérêt de notre problème est l'abscisse adimensionnée, δ , de l'extrémité droite du fluide 1 au cours du temps adimensionné, τ . Les variables adimensionnées sont définies comme suit : $\tau = t\sqrt{\frac{2|\mathbf{g}|}{l}}$ et $\delta = \frac{x}{l}$

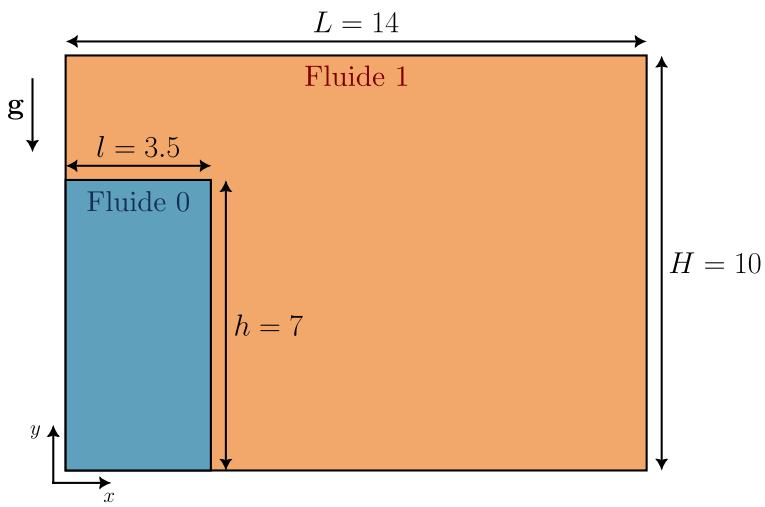


FIGURE 6.5 Représentation du champ de phase à l'instant $t = 0$ et description du domaine de calcul pour le cas test de rupture de digue

Le domaine du problème est décrit à la Figure 6.5 et on simule jusqu'au temps $t_f = 4.1$. Les propriétés physiques sont les suivantes :

- Fluide 0 : $\rho_0 = 1000$, $\nu_0 = 1 \times 10^{-6}$ (eau)
- Fluide 1 : $\rho_1 = 1.2$, $\nu_1 = 1.52 \times 10^{-2}$ (air)
- Coefficient de tension de surface : $\sigma = 0.073$

La direction du champ de gravité \mathbf{g} est selon l'axe y , de sens opposé et de norme $|\mathbf{g}| = 1$.

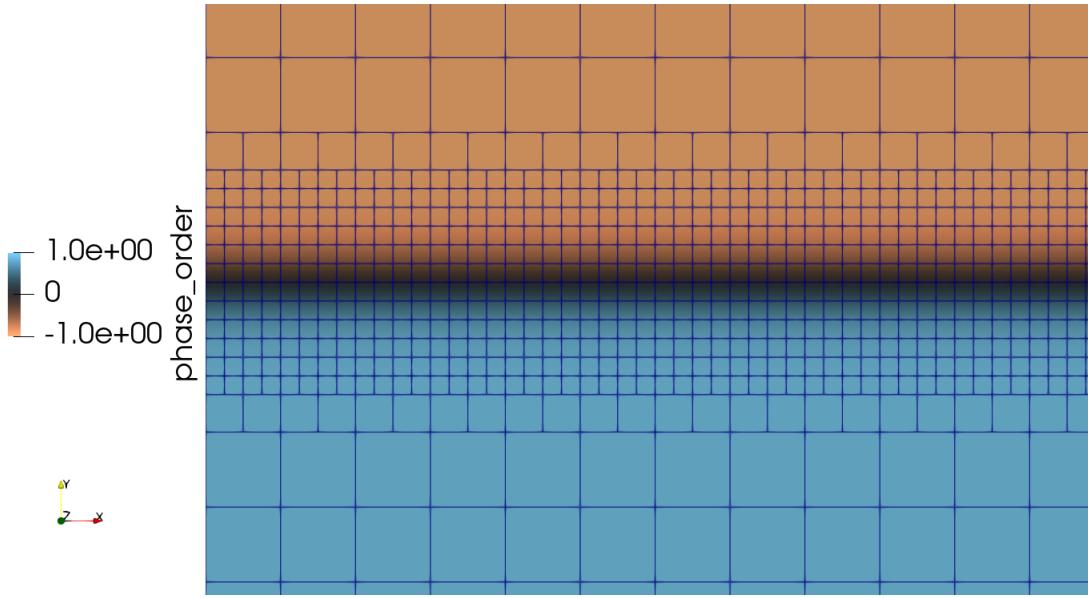


FIGURE 6.6 Visualisation du maillage à proximité de l'interface. On observe trois niveaux de raffinement distincts, avec les éléments les plus petits situés à l'interface entre les fluides.

Dans cet exemple, on utilise le raffinement adaptatif du maillage. Tout d'abord, on raffine uniformément le domaine tel que $\Delta x_{\text{uniforme}} = 0.125$. Ensuite, le maillage peut-être raffiné localement jusqu'à deux niveaux au-dessus, à proximité de l'interface, pour atteindre un pas $\Delta x_{\text{interface}} = 3.12 \times 10^{-2}$, ce que l'on voit à la Figure 6.6. Puisque ε est déterminé avec la plus petite taille de maillage, on a $\varepsilon = \sqrt{2}\Delta x_{\text{interface}} = 4.42 \times 10^{-2}$ et on prend un coefficient de mobilité $D \propto \varepsilon^2 = 1.95 \times 10^{-3}$. On utilise aussi un pas de temps adaptatif : le pas de temps initial est $\Delta t_0 = 0.01$, sa valeur peut-être augmentée ou diminuée pour que le nombre de Courant Friedrichs Lewy (CFL) reste en dessous d'une valeur spécifiée par l'utilisateur, on prend ici $CFL_{\max} = 0.5$.

On représente (Figure 6.7) δ en fonction du temps pour les simulations VOF et Cahn-Hilliard-Navier-Stokes (CHNS) ainsi que les mesures expérimentales de Martin et al. puis le système à différents temps à la Figure 6.8. On constate un accord raisonnable avec les mesures expérimentales, avec une légère sur-évaluation de la position latérale, qui est confirmé par les résultats d'une simulation avec un niveau de raffinement supplémentaire. Ce n'est donc pas un effet de maillage trop grossier. Cela peut-être dû à la légère diffusion de l'interface, comme on l'observe à la Figure 6.8. Le phénomène de diffusion de l'interface peut-être expliqué par la direction du champ de vitesse : là où la vitesse est perpendiculaire à l'interface, l'interface a tendance à se diffuser car elle est "étirée" à cause du terme advectif de l'équation du champ de phase. En temps normal, l'interface reprendrait son épaisseur initiale grâce au terme de contre-diffusion $\nabla \cdot (M(\phi)\nabla\eta)$, mais comme le fluide est accéléré par la gravité, il y a toujours

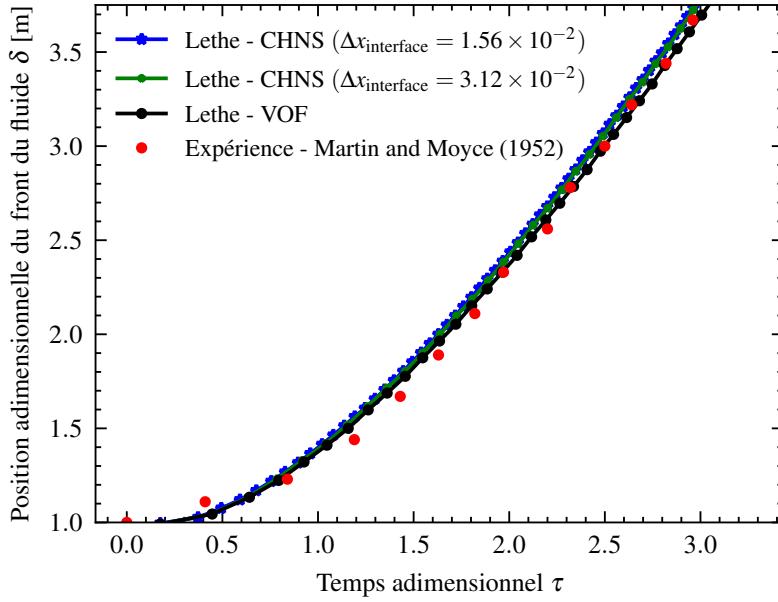


FIGURE 6.7 Évolution de l'abscisse adimensionnée du fluide 0 en fonction du temps pour trois cas : simulations numériques CHNS (en bleu et vert) pour deux niveaux de raffinement différents, simulation numérique VOF (en noir) et expérience de Martin et al. (en rouge)

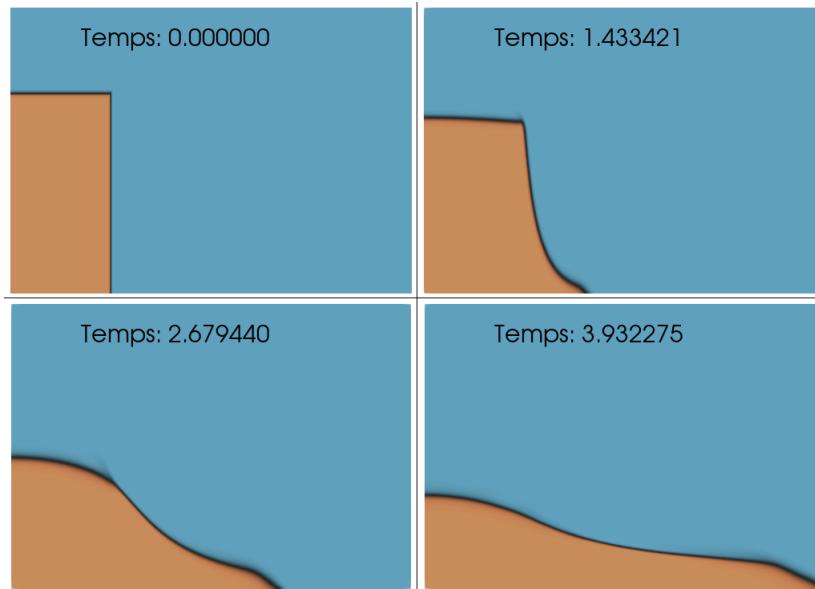


FIGURE 6.8 Représentation du champ de phase à différents instants de la simulation. On constate l'étalement du fluide plus dense sous l'effet du champ de gravité. Les temps indiqués correspondent aux temps adimensionnels suivants (de gauche à droite et de haut en bas) : $\tau = 0$, $\tau = 1$, $\tau = 2$ et $\tau_f = 3.19$

un étirement de l'interface qui a de plus en plus de mal à être compensé. Cette explication concorde avec la Figure 6.9 où l'on représente côte-à-côte les lignes de courant et le champ de phase. On y voit de plus que l'interface reste fine quand elle étirée dans sa longueur, ce qui est logique car ce mouvement de fluide n'implique pas d'advection de fluide 0 dans le fluide 1 (ou inversement). Pour contre-carrer cet effet, on peut par exemple augmenter le coefficient de diffusivité, en prenant garde de rester dans une gamme de valeur acceptable qui respecte les critères définis au chapitre précédent, dans la sous-section 5.2.4.

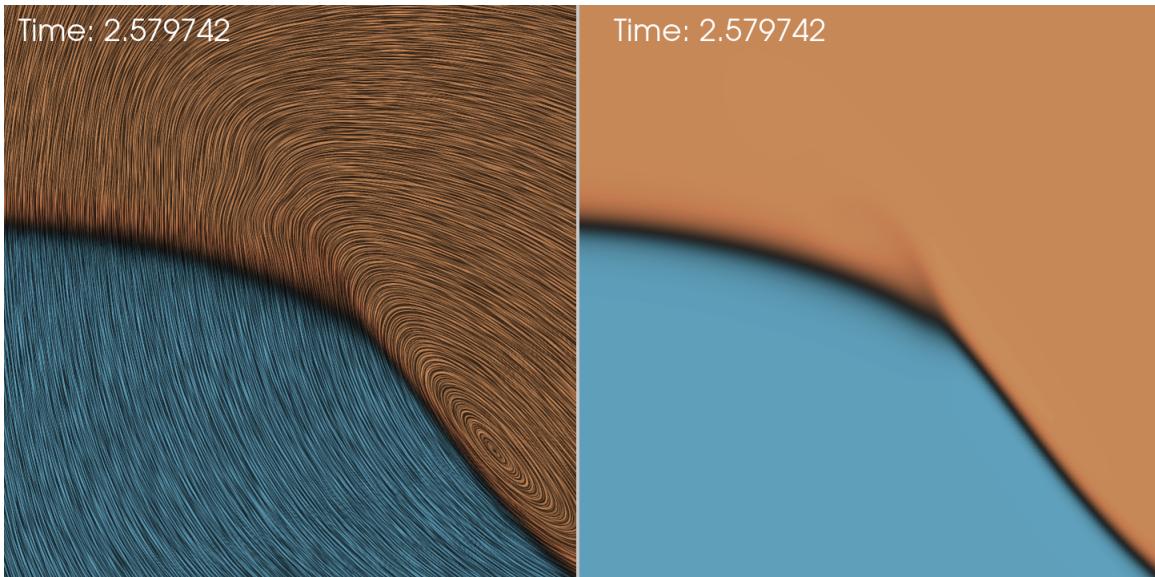


FIGURE 6.9 Représentation du champ de phase à $\tau = 1.95$ (à droite) et du champ de phase comportant le filtre LIC (Line Integral Convolution) (à gauche) permettant de visualiser simplement les lignes de courant dans le domaine. On constate que l'interface est diffusée là où le champ de vitesse est perpendiculaire à l'interface.

6.3.3 Instabilité de Rayleigh-Taylor : action de la gravité avec une interface complexe

Dans l'exemple précédent, on s'intéressait à un système dominé par la gravité dont l'interface se déformait peu.

Naturellement, l'étape suivante devrait vérifier que le solveur peut gérer des interfaces complexes qui naissent d'instabilités. On modélise donc le mouvement d'un fluide dense dans un fluide moins dense qui est situé en-dessous, ce qu'on appelle l'instabilité de Rayleigh-Taylor [7]. Les grandeurs que l'on observe sont les hauteurs de la *bulle* et de la *pointe*. La bulle correspond au plus haut point du fluide 0, la pointe au plus bas point du fluide 1. On simule le système décrit à la Figure 6.10, jusqu'au temps $t_f = 0.75$. On adimensionne le

temps en définissant $t^* = t\sqrt{\frac{g}{H}}$ où $g = 9.81$.

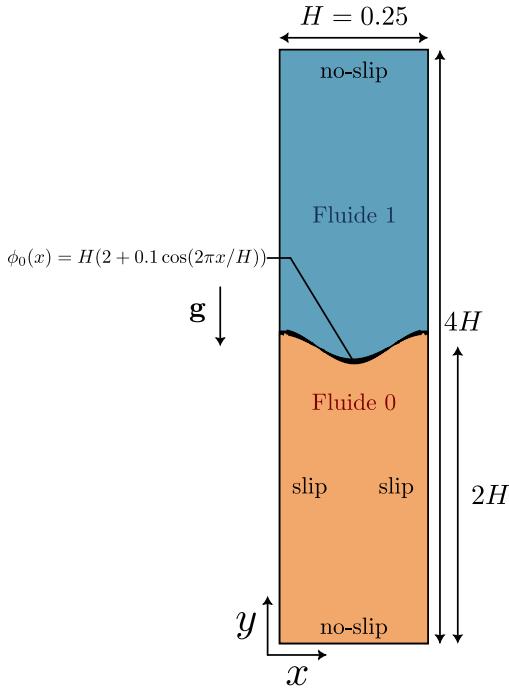


FIGURE 6.10 Représentation du système dans sa configuration initiale et définition des dimensions du problème d'instabilité de Rayleigh-Taylor.

que le modèle CHNS est plus cohésif. On voit en effet que le solveur CHNS a tendance à garder les parties d'une même phase connectées entre elles, plus que ne le ferait le modèle VOF. Ceci est dû à l'obligation de spécifier un coefficient de tension de surface, sans lequel l'équation de Cahn-Hilliard devient une simple équation d'advection. Si l'on prend un coefficient de tension de surface valant 0, on ne fait qu'advecter ϕ avec le champ de vitesse, et on rencontrerait alors les problèmes usuels d'oscillations liés aux équations d'advection. Cela vient de l'équation du potentiel chimique et du facteur multiplicateur λ qui est directement proportionnel à σ .

On illustre ce phénomène à la Figure 6.13 qui montre le champ de phase à $t = t_f$ pour une simulation où l'on a pris $\sigma = 0$. Ainsi, le terme diffusif permet d'atténuer naturellement les oscillations sans qu'il n'y ait besoin de rajouter de diffusion artificielle aux calculs.

Les propriétés physiques des fluides sont :

- Fluide 0 : $\rho_0 = 100$, $\nu_0 = 1.53 \times 10^{-3}$
- Fluide 1 : $\rho_1 = 300$, $\nu_1 = 1.53 \times 10^{-3}$
- Coefficient de tension de surface : $\sigma = 0.01$

Le champ de gravité est orienté selon l'axe y , de sens opposé et de norme $|\mathbf{g}| = 9.81$.

On utilise le raffinement adaptatif de maillage avec $\Delta x_{\text{uniforme}} = 7.81 \times 10^{-3}$ et $\Delta x_{\text{interface}} = 1.95 \times 10^{-3}$. Ceci donne $\varepsilon = \sqrt{2}\Delta x_{\text{interface}} = 2.766 \times 10^{-3}$ et $D \propto \varepsilon^2 = 7.67 \times 10^{-6}$. On utilise un pas de temps adaptatif avec $\Delta t_0 = 10^{-3}$ et $CFL_{\max} = 0.8$.

On compare qualitativement les solveurs CHNS et VOF à la Figure 6.11 puis on compare l'évolution des hauteurs y de la pointe et de la bulle à la Figure 6.12. Les grandeurs d'intérêt sont très similaires comme en témoigne la Figure 6.12, on note néanmoins

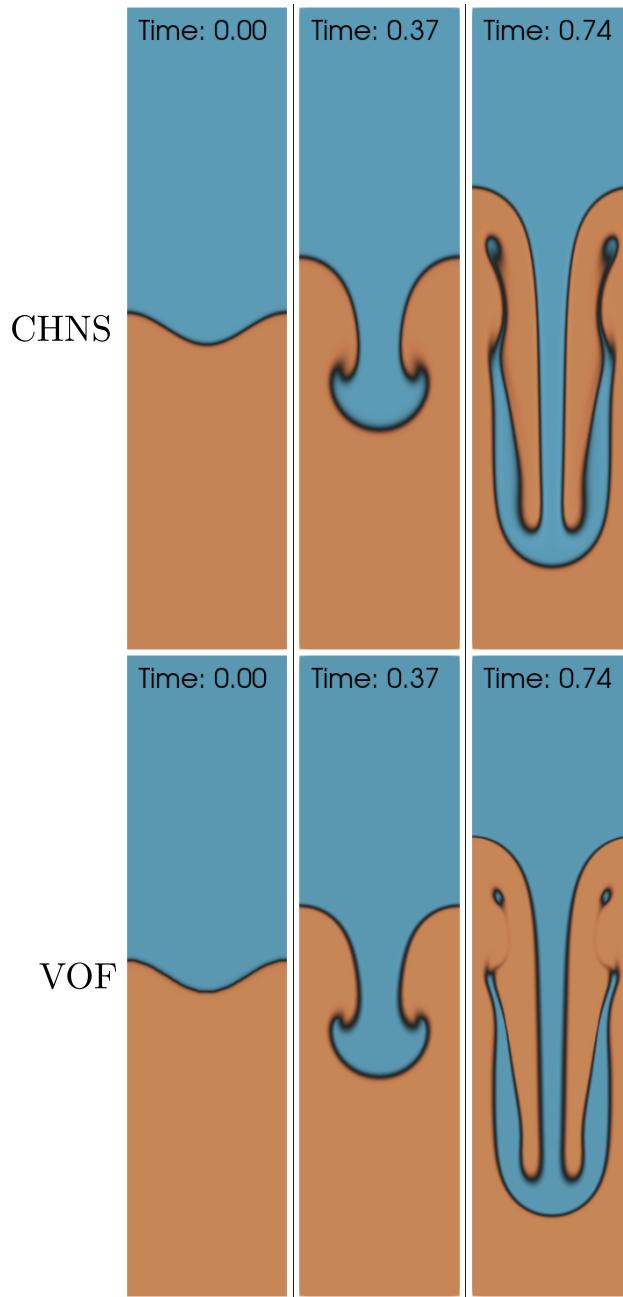


FIGURE 6.11 Représentation du système à plusieurs temps t correspondant aux temps t^* suivant : 0, 2.38 et 4.70. En haut, solveur CHNS, en bas solveur VOF

6.3.4 Loi de Jurin : montée capillaire et angle de contact

On souhaite maintenant vérifier l'implémentation des conditions d'angle de contact sur une paroi en testant un cas de montée capillaire entre deux plaques. Sans perte de généralité on ne s'intéresse qu'à l'un des deux côtés, puisque le problème est symétrique par rapport à son

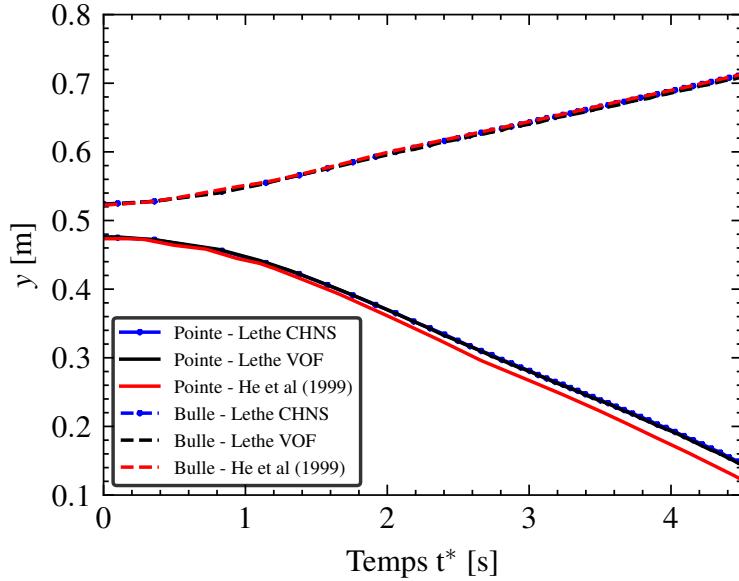


FIGURE 6.12 Évolution des hauteurs y de la bulle et de la pointe pour les simulations VOF, CHNS et la simulation de He et al. [7]

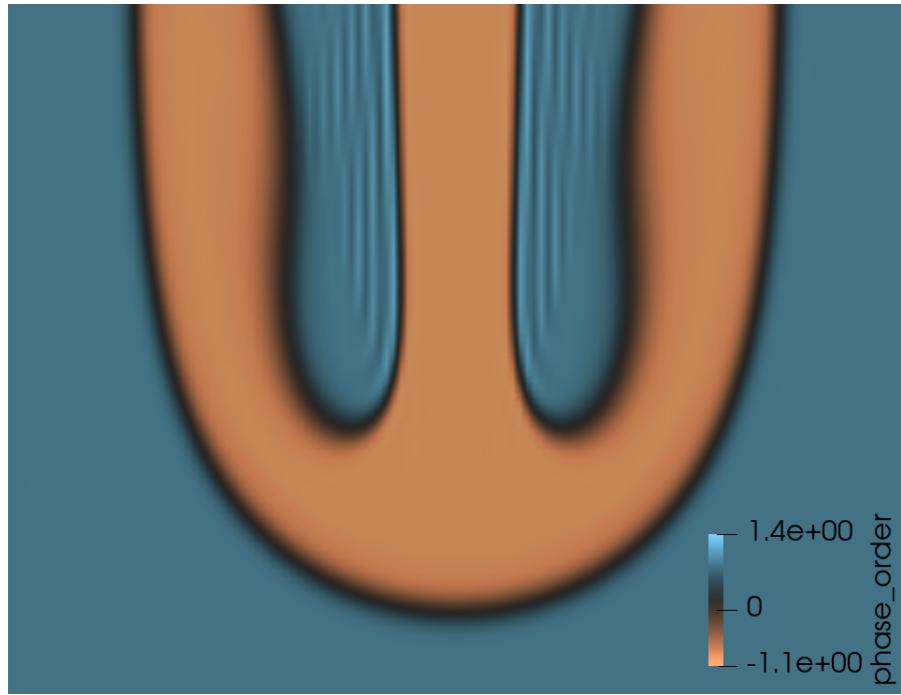


FIGURE 6.13 Représentation du champ de phase à $t = t_f$ pour $\sigma = 0$. On peut voir que le champ de phase présente des oscillations non-physiques qui créent des zones avec des valeurs de champ de phase aberrantes ($\phi > 1$ ou $\phi < 1$)

axe central. Le mouvement du fluide est dû à une différence de pression entre l'intérieur des plaques (représentées en gris à la Figure 6.14) et l'extérieur. La différence de pression est causée par la courbure du fluide, comme prévu par la loi de Young-Laplace (équation (6.16)), qui est dû à un angle de contact qu'on impose au fluide d'avoir avec la plaque. En faisant le bilan des forces sur le fluide, on peut déterminer la différence de hauteur entre le ménisque et la surface au repos, ce qu'on appelle la loi de Jurin [69] :

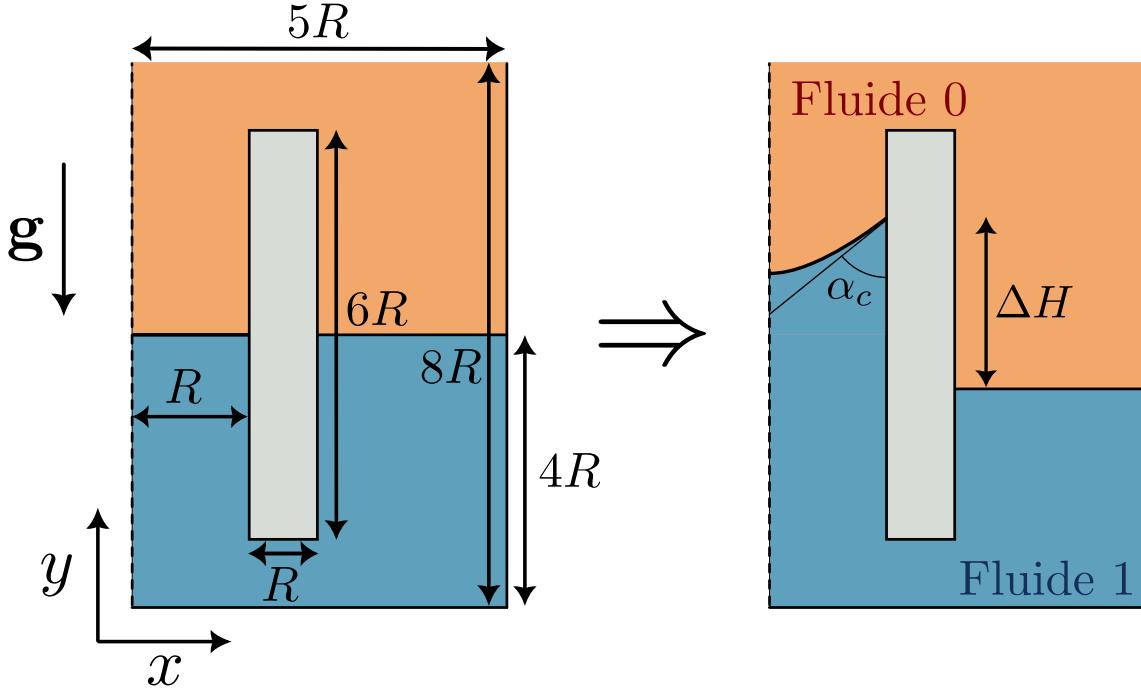


FIGURE 6.14 Représentation du mécanisme de montée capillaire entre les moments $t = 0$ et un temps arbitraire t_f . À cause de la condition d'angle de contact, le fluide au centre va s'élever (ou s'abaisser). On mesure alors la différence de hauteur entre le haut du ménisque et la surface du fluide à l'extérieur.

$$\Delta H = \frac{\sigma \cos(\alpha_c)}{\rho_l g R} \quad (6.20)$$

où ρ_l désigne la masse volumique de la phase liquide, qui monte (ou descend) par capillarité. On remarque que ΔH peut être aussi bien positif que négatif selon le signe de $\cos(\alpha_c)$, ainsi la colonne de fluide peut aussi bien s'élever que s'abaisser. Pour la simulation, on considère un domaine $\Omega = [0, 8] \times [0, 5]$ mm de hauteur $H = 8$ mm et de largeur $L = 5$ mm dans lequel on place une plaque. Toutes les dimensions sont présentées à la Figure 6.14, ainsi que les grandeurs d'intérêt du problème : l'angle de contact α_c et la différence de hauteur ΔH . Les dimensions du domaine sont inspirées du même exemple fait par Lovrić et al [47]. On note

que les propriétés physiques des fluides sont :

- Fluide 0 : $\rho_0 = 1$, $\nu_0 = 8.00 \times 10^{-5}$
- Fluide 1 : $\rho_1 = 2000$, $\nu_1 = 1.00 \times 10^{-4}$
- Coefficient de tension de surface : $\sigma = 0.073$

On simule sur l'intervalle de temps $[0, 0.5]$ en utilisant un pas de temps adaptatif avec $\Delta t_0 = 1 \times 10^{-4}$ qui pourra varier tout en gardant le nombre de CFL inférieur à 0.8 et en respectant la contrainte de temps capillaire $\Delta t < \Delta t_\sigma = 5 \times 10^{-4}$. On utilise un maillage adaptatif avec deux niveaux de raffinements de différence entre le maillage à l'interface et le maillage uniforme. On a donc $\Delta x_{\text{uniforme}} = 0.125$ mm et $\Delta x_{\text{interface}} = 0.0312$ mm. Ceci donne $\varepsilon = \sqrt{2} \Delta x_{\text{interface}} = 0.044$ mm. Pour le coefficient de mobilité, les tentatives pour faire fonctionner cet exemple ont montré que $D = 1 \times 10^{-7}$ produisait des résultats cohérents. Ce qui ne suit *a priori* aucun critère évoqué précédemment.

Des conditions aux frontières de glissement sont appliquées sur toutes les parois, à l'exception de la paroi supérieure où l'on impose une contrainte nulle pour les champs de vitesse et de pression. On applique ensuite la condition d'angle de contact α_c sur le côté gauche de la plaque. Toutes les autres frontières sont munies de conditions de flux nul, tant pour ϕ que pour η . On remplit le domaine de fluide 1 jusqu'à sa moitié, l'autre moitié est du fluide 0. Les angles de contact choisis sont : $\{30, 50, 70, 90, 110, 130, 150\}$ (en degrés ($^\circ$)), ils correspondent à des surfaces hydrophiles ($\alpha_c < 90^\circ$) et hydrophobes ($\alpha_c > 90^\circ$). Pour calculer ΔH numériquement, on soustrait la hauteur de la surface extérieure à la hauteur du ménisque, prise en son point le plus haut (comme indiqué à la Figure 6.14), de sorte que ΔH est positif si le liquide s'est élevé, négatif sinon.

On présente les résultats obtenus à la Figure 6.15 pour la gamme d'angles de contact choisie et on compare chaque hauteur numérique à la hauteur analytique prévue par la loi de Jurin. On observe un très bon accord entre la théorie et nos résultats. En outre, en visualisant les champs de pression à proximité du ménisque à la fin de la simulation, on observe à la Figure 6.16 qu'ils correspondent bien qualitativement aux surpressions ou dépressions prévues par la loi de Young-Laplace. On conclut que la condition d'angle de contact se couple adéquatement avec les équations de Navier-Stokes.

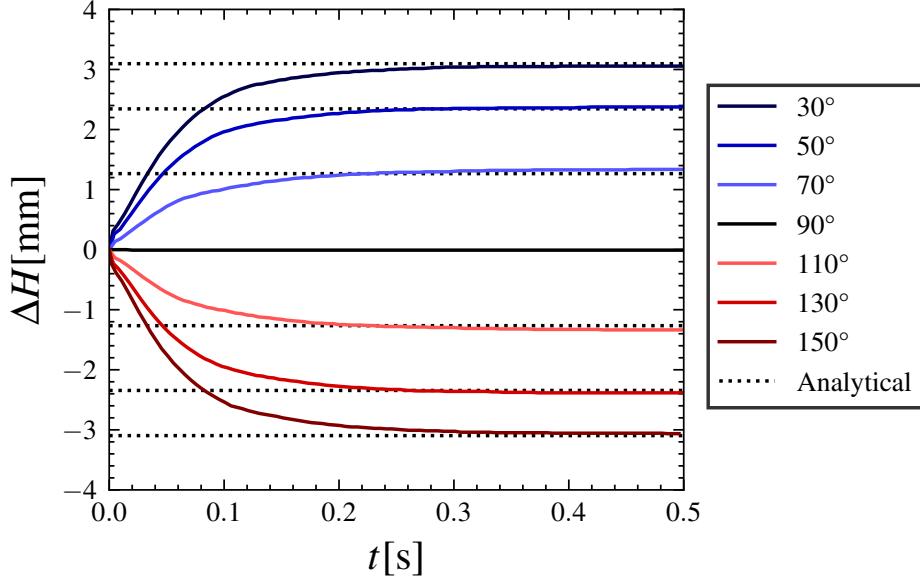


FIGURE 6.15 Évolution de la différence de hauteur ΔH au cours du temps pour différentes valeurs d'angle de contact $\alpha_c \in \{30, 50, 70, 90, 110, 130, 150\}$ degrés ($^\circ$) et comparaison à la hauteur analytique prévue par la loi de Jurin (équation (6.20)).

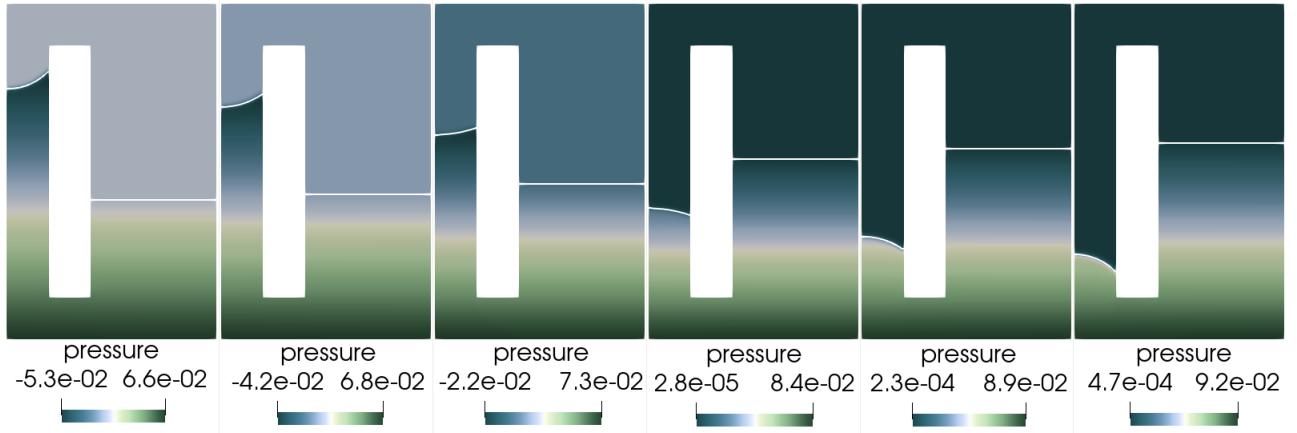


FIGURE 6.16 Représentation des champs de pression au temps $t = 0.5$ pour tous les angles de contact simulés. De gauche à droite : $\alpha_c = 30^\circ, 50^\circ, 70^\circ, 110^\circ, 130^\circ, 150^\circ$. On observe des zones de dépression à proximité des surfaces ayant une courbure négative ($\alpha_c < 90^\circ$) et des zones de surpression à proximité des surfaces de courbure positive ($\alpha_c > 90^\circ$)

6.3.5 Oscillations 2D de bulles

Pour vérifier la implémentation des forces de tension de surface, on propose l'analyse des oscillations d'une bulle autour d'une position d'équilibre, en prenant les mêmes paramètres que [47]. L'idée est d'initialiser une goutte d'eau entourée d'air dans un de ses états d'excitation.

tation et de la regarder évoluer et osciller au cours du temps, pour retrouver une certaine période d'oscillation. Ce cas est similaire à un ressort que l'on comprimerait (ou tendrait) et qu'on verrait osciller autour de sa position d'équilibre. On envisage deux cas d'étude : des petites oscillations où les effets visqueux sont négligeables et des grandes oscillations pour lesquelles le frottement visqueux doit être pris en compte. On verra que l'effet de la viscosité conduit à des résultats non-conformes à la théorie. On place une goutte de liquide au centre d'un domaine carré $\Omega = [-5 \times 10^{-4}, 5 \times 10^{-4}] \times [-5 \times 10^{-4}, 5 \times 10^{-4}]$ que l'on initialise comme suit :

$$\phi_{0,n}(x, y) = \tanh\left(\frac{R(1 + 0.02 \cos(n \arctan(y, x))) - \sqrt{x^2 + y^2}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \quad (6.21)$$

pour des petites oscillations et :

$$\phi_{0,n}(x, y) = \tanh\left(\frac{R(1 + 0.2 \cos(n \arctan(y, x))) - \sqrt{x^2 + y^2}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \quad (6.22)$$

pour des grandes oscillations, avec $R = 1.25 \times 10^{-4}$ m. n correspond au mode de l'excitation. On peut se référer à la Figure 6.17 pour visualiser la forme des gouttelettes à l'initialisation. Les dimensions sont volontairement exagérées pour les petites oscillations pour faciliter la compréhension. Les propriétés physiques des fluides sont :

- Fluide 0 : $\rho_0 = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$, $\nu_0 = 1.01 \times 10^{-6} \text{ Pa.s}$ (eau)
- Fluide 1 : $\rho_1 = 1.23 \text{ kg.m}^{-3}$, $\nu_1 = 1.52 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$ (air)
- Coefficient de tension de surface : $\sigma = 0.073 \text{ N.m}^{-1}$

On utilise le raffinement adaptatif de maillage avec $\Delta x_{\text{uniforme}} = 6.25 \times 10^{-5}$ m et $\Delta x_{\text{interface}} = 3.91 \times 10^{-6}$ m. Ceci donne $\varepsilon = \sqrt{2}\Delta x_{\text{interface}} = 5.52 \times 10^{-6}$ m et $D \propto \varepsilon^2 = 3.05 \times 10^{-11}$. On utilise un pas de temps Δt qui respecte la limite de pas de temps capillaire Δt_σ . Le pas de temps capillaire est défini comme suit :

$$\Delta t_\sigma = \sqrt{\frac{(\rho_0 + \rho_1)\Delta x_{\text{interface}}^3}{4\pi\sigma}} \quad (6.23)$$

Ainsi, $\Delta t = \Delta t_\sigma = 1.28 \times 10^{-7}$ s. La quantité à laquelle on s'intéresse dépend de la valeur de n , elle correspond à l'une des coordonnées d'une extrémité de la gouttelette qui varie périodiquement. Il s'agit du point P sur la Figure 6.17. Il existe une formule analytique donnant la période d'oscillation pour un certain n donné [70] :

$$T_n = 2\pi \sqrt{\frac{\rho_0 R^3}{(n^3 - n)\sigma}} \quad (6.24)$$

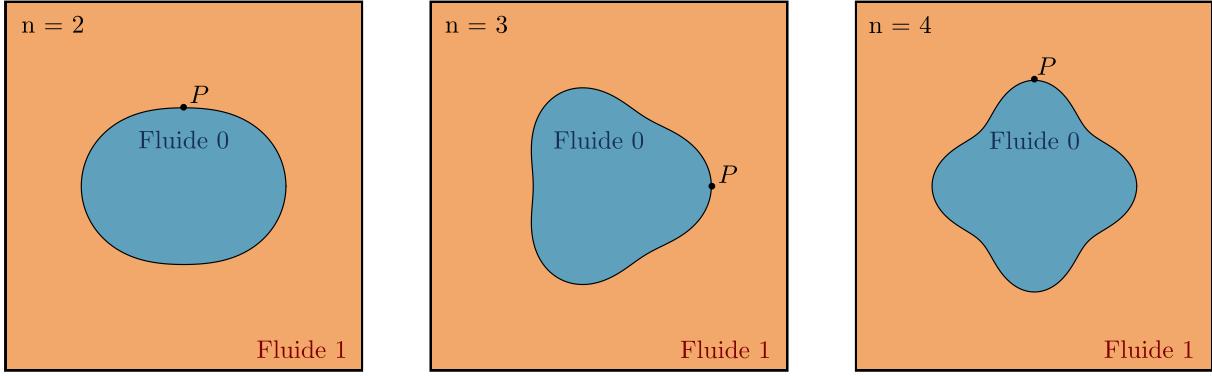


FIGURE 6.17 Représentation du champ de phase initial pour différentes valeurs de n . De gauche à droite : $n = 2$, $n = 3$ et $n = 4$

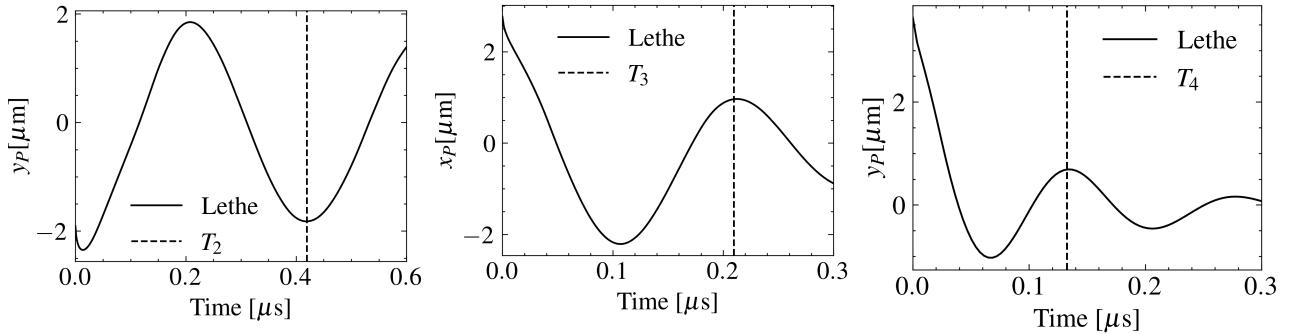


FIGURE 6.18 Représentation de l'évolution de la position du point P au cours du temps (en trait plein) pour des petites oscillations et la période analytique (en pointillés) prévue par l'équation (6.24) pour $n \in \{2, 3, 4\}$ de gauche à droite.

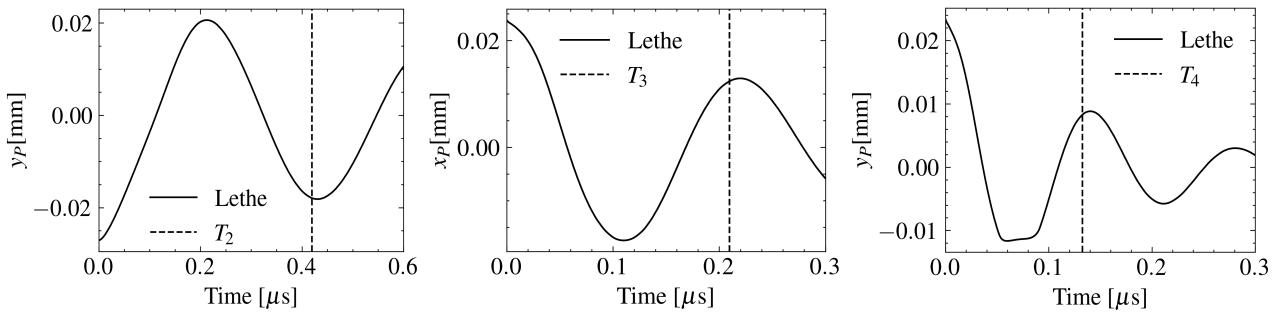


FIGURE 6.19 Représentation de l'évolution de la position du point P au cours du temps (en trait plein) pour des grandes oscillations et la période analytique (en pointillés) prévue par l'équation (6.24) pour $n \in \{2, 3, 4\}$ de gauche à droite.

On observe un très bon accord entre les périodes numériques et analytiques pour les petites oscillations comme en témoigne la Figure 6.18 où l'on représente la coordonnée d'intérêt du

point P au cours du temps en indiquant d'une barre verticale la période analytique pour différentes valeurs de n . Cet accord est plus discutable pour le cas des grandes oscillations, ce qui est attendu car les effets visqueux ne sont plus négligeables, et donc l'équation (6.24) n'est plus valable. On observe par exemple sur le graphique correspondant à $n = 4$ que les effets visqueux sont si intenses que le point P est extrêmement ralenti au cours de la première oscillation. Néanmoins les champs de vitesse et de pression restent cohérents et l'on observe qu'ils sont symétriques par rapport aux axes de symétrie du problème, comme en témoignent les Figures 6.20 et 6.21. L'intensité du champ de pression décroît car de l'énergie est dissipée par frottement visqueux avec le liquide environnant, ainsi la bulle s'étire moins intensément, la courbure est donc moins élevée et la pression résultante elle aussi.

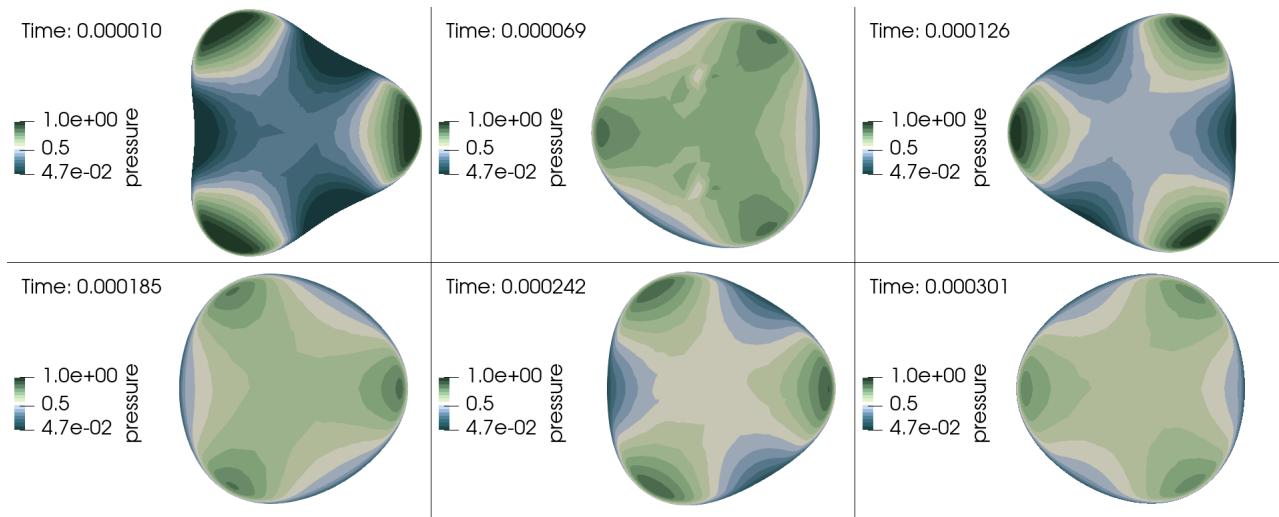


FIGURE 6.20 Représentation du champ de pression à l'intérieur de la gouttelette pour différents temps, dans le cas $n = 3$. On observe des zones de dépression là où la courbure est négative et des zones de surpression là où elle est positive.

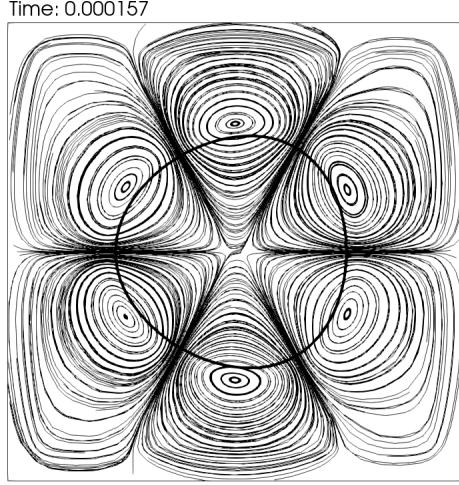


FIGURE 6.21 Représentation des lignes de courant au temps $t =$ dans le domaine pour le cas $n = 3$. On retrouve les axes de symétrie du problème puisque les lignes de courant sont réparties par zones, délimitées par les axes de symétrie du problème.

6.3.6 Bulle montante 2D

Il s'agit d'un cas test classique en écoulements polyphasiques reproduit par de nombreux logiciels (voir [71–73]) qui vise à simuler la montée d'une bulle de fluide peu dense dans une colonne d'un autre fluide plus dense. La montée de la bulle est uniquement due aux forces de flottabilité. Malgré son apparente simplicité, ce problème regorge de complexités car les forces de tension de surface et de frottement visqueux y sont intensément couplées. En effet, lors de son ascension, la bulle subit d'abord une accélération liée à la poussée d'Archimède qui va augmenter linéairement sa vitesse.

Cette vitesse augmente les frottements visqueux qui vont déformer la bulle et tendre sa surface (à la manière d'un ressort). À cause de la courbure intense, les forces de tension de surface vont prendre le dessus sur les forces de frottements visqueux pour rendre à la bulle sa forme sphérique. Quand ces deux forces (frottement et tension de surface) sont à l'équilibre, un régime permanent est atteint et la bulle continue de s'élever avec une vitesse et une forme constante. On s'attend donc à ce que la vitesse augmente linéairement puis atteigne un maximum, là où les frottements visqueux sont les plus intenses, avant de se stabiliser à une valeur intermédiaire.

Pour la simulation, on considère un domaine $\Omega = [0, 1] \times [0, 2]$ de hauteur $L = 2$ et de largeur $l = 1$. On place une bulle (fluide 1) circulaire de rayon $R = 0.25$ au point $(0.5, 0.5)$. En présence du champ de gravité $\mathbf{g} = -0.98\mathbf{e}_y$, la bulle s'élève dans le fluide 0, plus dense, par l'action de la poussée d'Archimède. Les propriétés physiques sont les suivantes :

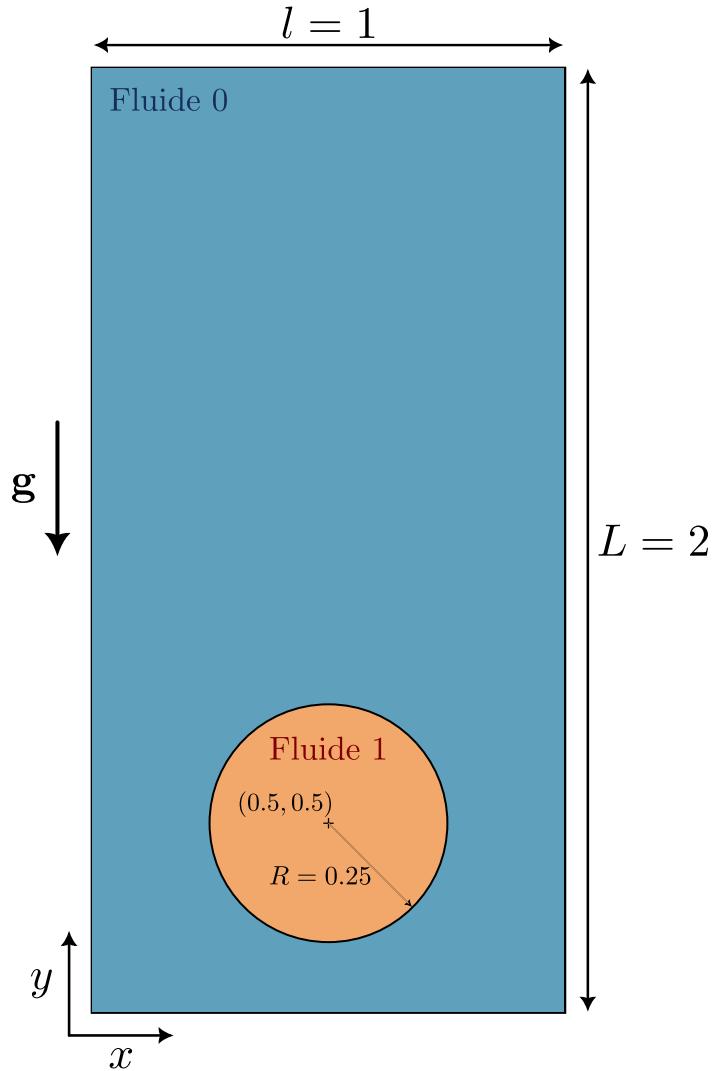


FIGURE 6.22 Représentation du problème de bulle montante au temps $t = 0$ avec les dimensions et les paramètres du problème.

- Fluide 0 : $\rho_0 = 1000$, $\nu_0 = 1.00 \times 10^{-2}$
- Fluide 1 : $\rho_1 = 100$, $\nu_1 = 1.00 \times 10^{-2}$
- Coefficient de tension de surface : $\sigma = 24.5$

On utilise le raffinement adaptatif de maillage avec $\Delta x_{\text{uniforme}} = 1.56 \times 10^{-2}$ et $\Delta x_{\text{interface}} = 3.91 \times 10^{-3}$. Ceci donne $\varepsilon = \sqrt{2}\Delta x_{\text{interface}} = 5.52 \times 10^{-3}$ et $D \propto \varepsilon^2 = 3.06 \times 10^{-5}$. On utilise un pas de temps constant avec $\Delta t_0 = 1 \times 10^{-3}$. On simule le problème jusqu'au temps $t_f = 3$

avec un schéma **BDF1**. On initialise le champ de phase et de potentiel chimique comme suit :

$$\phi_0(x, y) = -\tanh\left(\frac{R - \sqrt{(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \quad (6.25)$$

$$\eta_0(x, y) = 0 \quad (6.26)$$

On s'intéresse à la vitesse d'ascension de la bulle (qui est la vitesse de son barycentre selon l'axe e_y), la position verticale de son barycentre et le contour de la bulle au temps final que l'on compare aux résultats numériques obtenus par Hysing et al. [9], Zahedi et al. [8] et les résultats produits par le solveur VOF de Lethe.

On observe une excellente conformité entre les résultats de notre simulation, présentés aux Figures 6.23, 6.24 et 6.25, et les résultats des autres solutions numériques, qui sont basées sur des modèles différents. On observe sur le graphique de vitesse verticale les phases décrites dans l'introduction de l'exemple, notamment la transition de régime linéaire dominé par la gravité au régime non-linéaire dominé par les forces visqueuses.

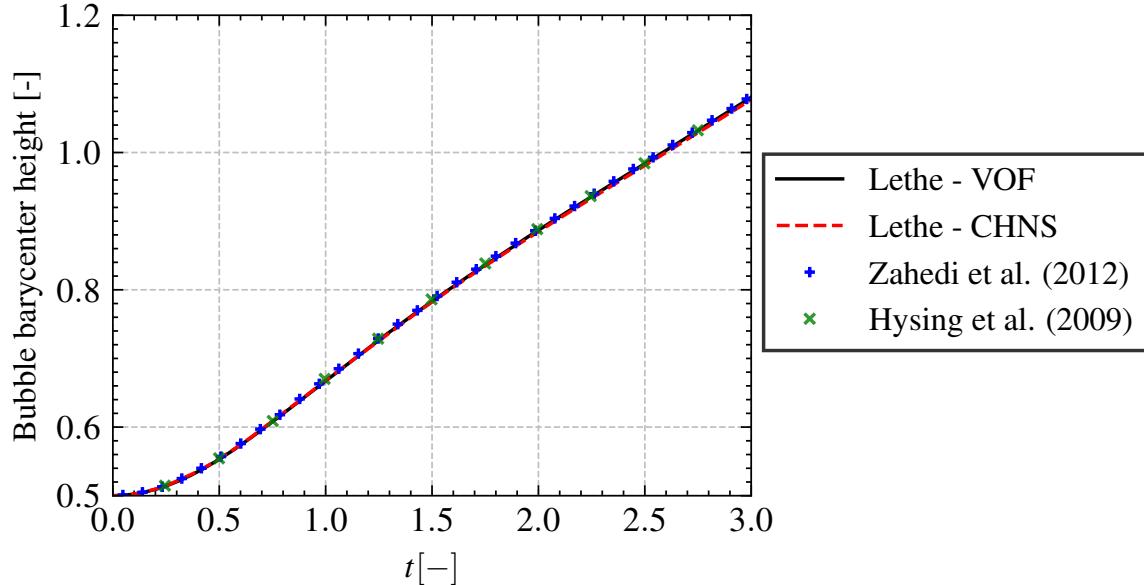


FIGURE 6.23 Évolution de l'ordonnée du barycentre de la bulle au cours du temps et comparaison aux valeurs expérimentales de Zahedi et al. [8] et Hysing et al. [9]

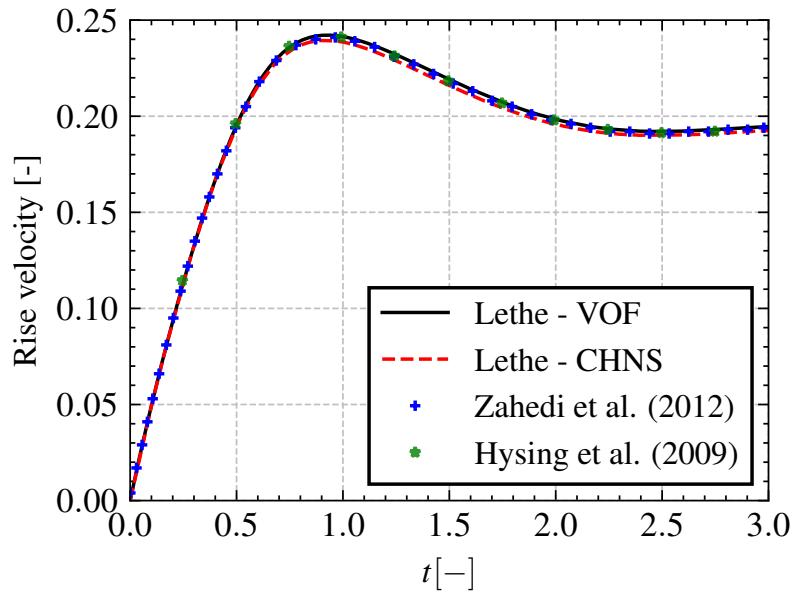


FIGURE 6.24 Évolution de la vitesse du barycentre de la bulle au cours du temps et comparaison aux valeurs expérimentales de Zahedi et al. [8] et Hysing et al. [9]

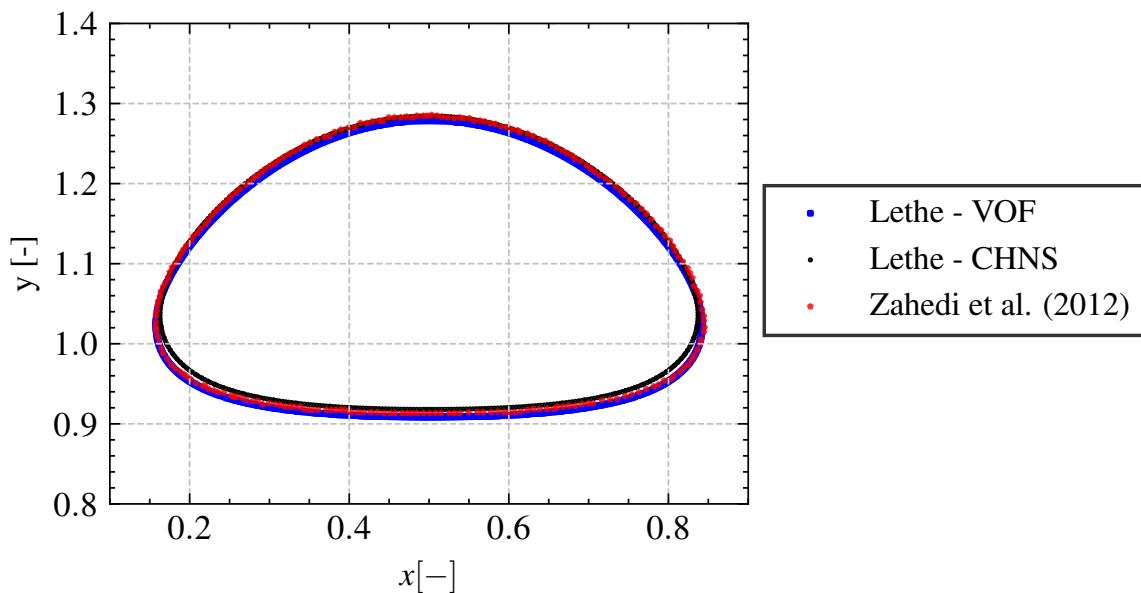


FIGURE 6.25 Contour de la bulle au temps $t = 3$ et comparaison au contour obtenu par Zahedi et al. [8]

6.4 Détachement de bulles en flux de cisaillement

6.4.1 Introduction

Tous les cas test précédent ont démontré les capacités de notre solveur Cahn-Hilliard-Navier-Stokes, on s'attaque maintenant à un cas industriel plus complexe : le détachement de bulles en présence d'un flux de cisaillement. On rencontre ce genre de problème dans l'industrie chimique, par exemple, si l'on considère une cuve chauffée et agitée et qu'on s'intéresse à la formation d'une certaine espèce gazeuse par évaporation au voisinage des éléments chauffant. Dans ce cas-là, le mouvement du liquide pourrait influencer le détachement de la bulle à cause du frottement visqueux à sa surface, cet effet viendrait s'ajouter aux forces de flottabilité. A priori, il n'est pas clair quelle influence exacte a le mouvement du liquide environnant sur le détachement de la bulle ni quelle est l'influence des paramètres physiques sur le problème. Ce mécanisme mérite donc qu'on s'y attarde, cela permettra aussi de démontrer les capacités du solveur CHNS dans un cas industriel qui combine des effets de frottement visqueux, de flottabilité et de détachement en trois dimensions. On comparera une partie des résultats obtenus avec les résultats de Mirsandi et al. [10] dont on s'inspire pour la définition du problème et la gamme de paramètres étudiés.

6.4.2 Méthodologie de l'exemple

Pour simuler ce problème, les auteurs de l'article utilisent une technique appelée Local Front Reconstruction Method (LFRM), une méthode hybride entre *front tracking* et *front capturing* décrite par Shin et al. [74]. Puis les auteurs reproduisent numériquement des résultats expérimentaux issus de leurs expériences, et montrent que, dans les cas étudiés, les volumes et temps de détachement observés concordent avec l'expérience. Grâce à ces résultats prometteurs, que l'on montre à la Figure 6.26, les auteurs estiment que leur code est capable de donner des résultats satisfaisants et proposent de faire un balayage paramétrique sur les propriétés physiques du fluide. Ils font alors varier la masse volumique, la viscosité et le coefficient de tension de surface du fluide et analysent leurs résultats en calculant le temps de détachement (t_{det}) et le volume de la bulle au détachement (V_{det}). Cette étude est précédée d'une analyse de convergence en maillage pour déterminer le niveau de raffinement nécessaire à leurs simulations.

Dans cet exemple, l'étude de convergence en maillage est reproduite avec les mêmes paramètres physiques que dans l'article, on en déduit la taille de maille et les autres paramètres numériques qui en découlent. Cette première étape permet de valider en partie les résultats du code. Puis on simule des détachements de bulle sans flux cisaillant, afin d'isoler l'effet

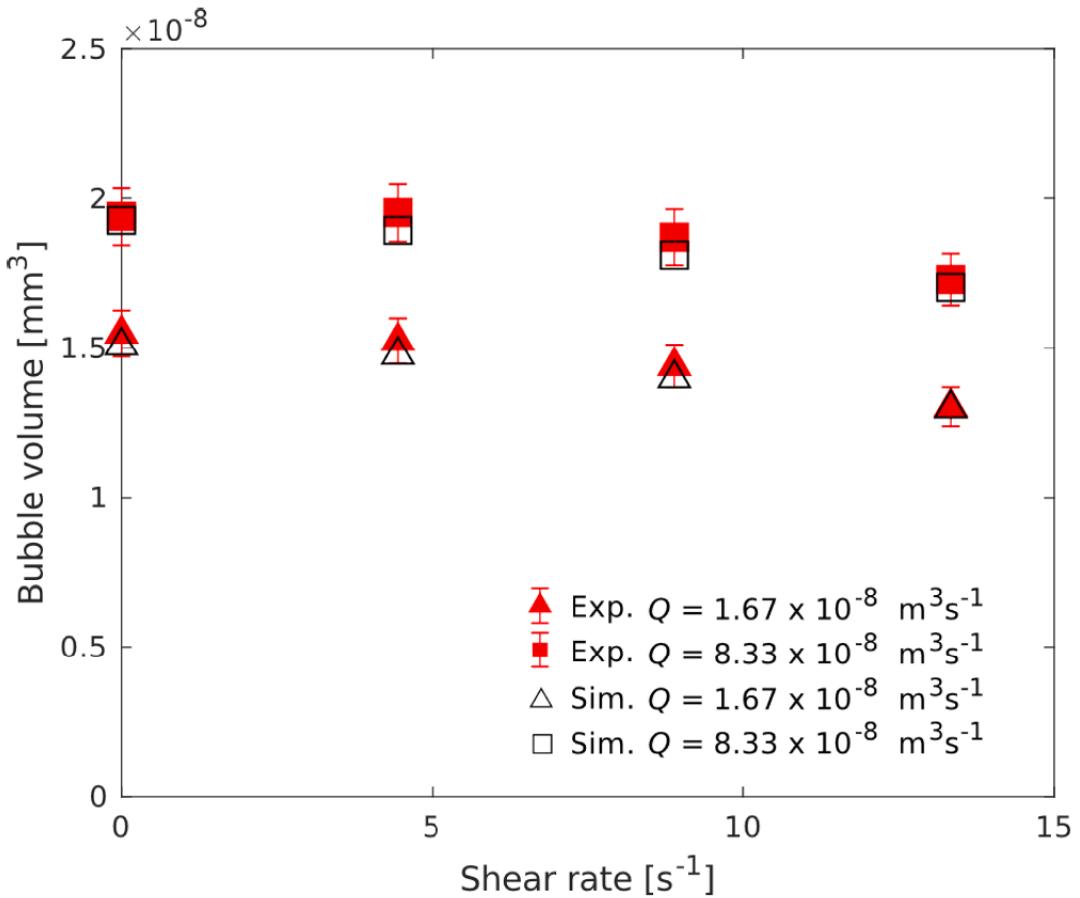


FIGURE 6.26 Comparaison des volumes au détachement mesurés expérimentalement (en rouge) et numériquement (en noir) dans l'article de Mirsandi et al. [10]. Cette comparaison sert de validation pour leur modèle numérique. Tiré directement de [10], sous licence Creative Commons CC-BY (hyperlien).

des propriétés physiques sur le détachement. Ensuite, on effectue un premier balayage sur le taux de cisaillement S , sans changer les propriétés du fluide, ce qui permet de comparer les résultats à ceux de Mirsandi et al. Finalement, on fait varier en même temps les propriétés physiques, ρ_l , la masse volumique du liquide en mouvement et σ , le coefficient de tension de surface, puis le taux de cisaillement, et on compare la tendance de l'évolution des quantités d'intérêt à la tendance observée par les auteurs. On note que dans ce dernier balayage paramétrique, les paramètres sont différents de ceux utilisés par les auteurs, aussi une comparaison directe n'est pas possible. C'est pour cette raison que l'on ne s'intéresse qu'à la tendance générale. Plus précisément, cette étude vise à retrouver la monotonie des résultats observés dans l'article de référence. On s'attend à retrouver que le temps de détachement et le volume de détachement sont inversement proportionnels au taux de cisaillement et au

coefficient de tension de surface et proportionnels à la densité du liquide environnant. De plus, on s'attend à retrouver des ordres de grandeurs similaires pour les temps et volumes de détachement, sans pour autant avoir d'accord impeccable.

6.4.3 Définition des paramètres

On distingue deux cas : le fluide est au repos et seule la flottabilité provoque le détachement de la bulle et le fluide est en mouvement, le frottement visqueux et la flottabilité provoquent le détachement de la bulle. Cette distinction est nécessaire car on doit changer les frontières du domaine et les conditions aux frontières associées. Ceci pour limiter le coût en calcul des simulations du balayage paramétrique.

Fluide au repos

Dans le premier cas (liquide au repos), le domaine Ω est un cube de côtés de longueur $H = 8$ mm défini par $\Omega = [-4, 4] \times [0, 8] \times [-4, 4]$, les dimensions sont selon x , y et z respectivement. Ω est placé dans un champ de pesanteur $\mathbf{g} = g\mathbf{e}_y$ où $g = 9810$ mm.s $^{-2}$. L'injection d'air se fait par un orifice circulaire de rayon $R_0 = 0.5$ mm sur la paroi inférieure du domaine (plan xz) et dont le centre est le point $O = (0, 0, 0)$. L'air est injecté avec un profil parabolique $\mathbf{v}_{\text{in,a}}(x, z) = v_{\max} \left(1 - \frac{x^2+z^2}{R_0^2}\right) \mathbf{e}_y$, correspondant à un flux d'air $Q = 5.0 \times 10^2$ mm 3 s $^{-1}$. On représente une coupe 2D dans le plan xy du domaine 3D à la Figure 6.27.

Les conditions aux frontières employées sont les suivantes :

- Paroi inférieure : condition de Dirichlet sur la vitesse et sur le champ de phase. Si $(x^2 + z^2) < 0.5$ alors $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{\text{in,a}}(x, z)$. Sinon, $\mathbf{v} = 0$ (non-glisser (no-slip) hors de l'orifice). Condition de Dirichlet sur le champ de phase : $\phi(x, z) = -\tanh\left((R_0 - \sqrt{x^2 + z^2})/(\sqrt{2}\varepsilon)\right)$. Ces deux conditions aux frontières réunies imitent une entrée d'air.
- Parois latérales : conditions de glissement (slip)
- Paroi supérieure : condition de sortie (outlet), telle que décrite par Arndt et al. [65].

Toutes les frontières autres que la paroi inférieure ont une condition de flux nul pour la phase et le potentiel chimique.

On initialise le champ de phase comme suit :

$$\phi_0(x, y, z) = -\tanh\left(\frac{R_0 - \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \quad (6.27)$$

Le potentiel chimique est initialisé à $\eta = 0$ dans tout Ω . De même, la vitesse initiale du liquide est nulle dans tout Ω

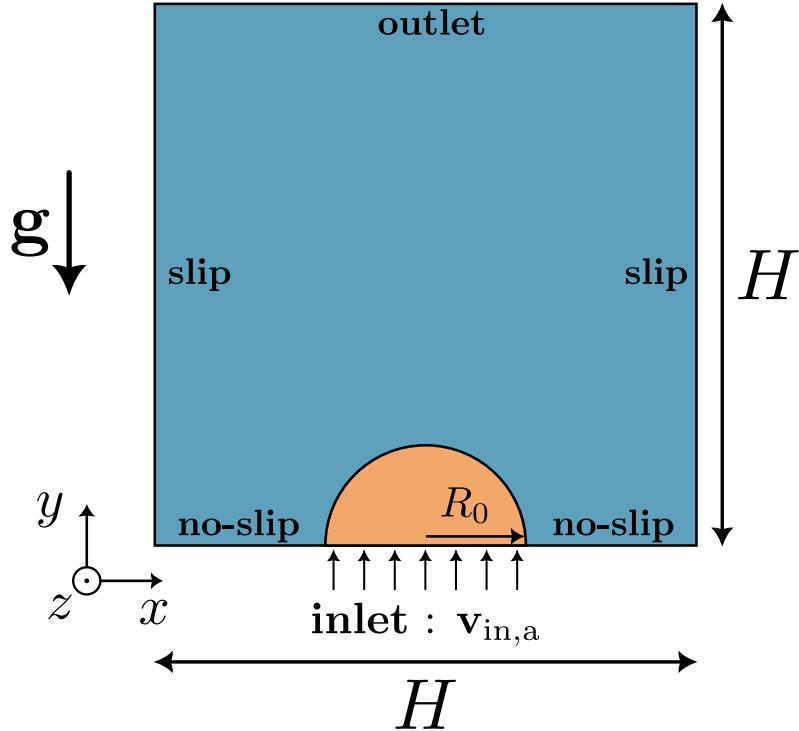


FIGURE 6.27 Schéma d'une coupe 2D dans le plan xy du domaine Ω pour le cas de fluide au repos.

Fluide en mouvement

Dans ce deuxième cas, le domaine Ω est un parallélépipède droit de dimensions $L = 12$ mm (selon x), $l = 5$ mm (selon z) et $H = 5$ mm (selon y) défini par $\Omega = [-4, 8] \times [0, 5] \times [-2.5, 2.5]$, les dimensions selon x , y et z respectivement. On décompose la grande longueur L en deux sous-longueurs L_1 et L_2 telles que $L = L_1 + L_2$. $L_1 = 4$ mm correspond à la longueur entre l'entre l'extrémité gauche du domaine et le centre de l'entrée d'air. $L_2 = 8$ mm correspond à la longueur entre le centre de l'entrée d'air et l'extrémité droite du domaine. Le champ de pesanteur est le même que précédemment. L'injection d'air se fait par un orifice circulaire de rayon $R_0 = 0.5$ mm sur la paroi inférieure du domaine (plan xz) et dont le centre est le point $O = (0, 0, 0)$. L'air est injecté avec un profil parabolique $\mathbf{v}_{in,a}(x, z) = v_{max,a} \left(1 - \frac{x^2+z^2}{R_0^2}\right) \mathbf{e}_y$, correspondant à un flux d'air $Q = 5.0 \times 10^2 \text{ mm}^3\text{s}^{-1}$. On représente une coupe 2D dans le plan xy du domaine 3D à la Figure 6.28.

Les conditions aux frontières employées sont les suivantes :

- Paroi inférieure : condition de Dirichlet sur la vitesse. Si $(x^2 + z^2) < 0.5$ alors $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{in}(x, z)$. Sinon, $\mathbf{v} = 0$ (non-glisser hors de l'orifice). Condition de Dirichlet sur le champ de phase : $\phi(x, z) = -\tanh\left((R_0 - \sqrt{x^2 + z^2}) / (\sqrt{2}\varepsilon)\right)$. Ces deux conditions

aux frontières réunies imitent une entrée d'air.

- Entrée de liquide : plan yz pour $x = -4$. On injecte un profil linéaire de vitesse tel que $\mathbf{v}_{\text{in},l}(y) = v_{\text{max},l} \frac{y}{H} \mathbf{e}_x$
- Paroi supérieure : plan xz pour $y = 5$. Condition de Dirichlet sur la vitesse : $\mathbf{v} = v_{\text{max},l} \mathbf{e}_x$
- Parois latérales restantes : plans xy pour $z = -2.5$ et $z = 2.5$. Condition de glissement
- Sortie de liquide : plan yz pour $x = 8$. Condition de sortie (outlet), telle que décrite par Arndt et al. [65].

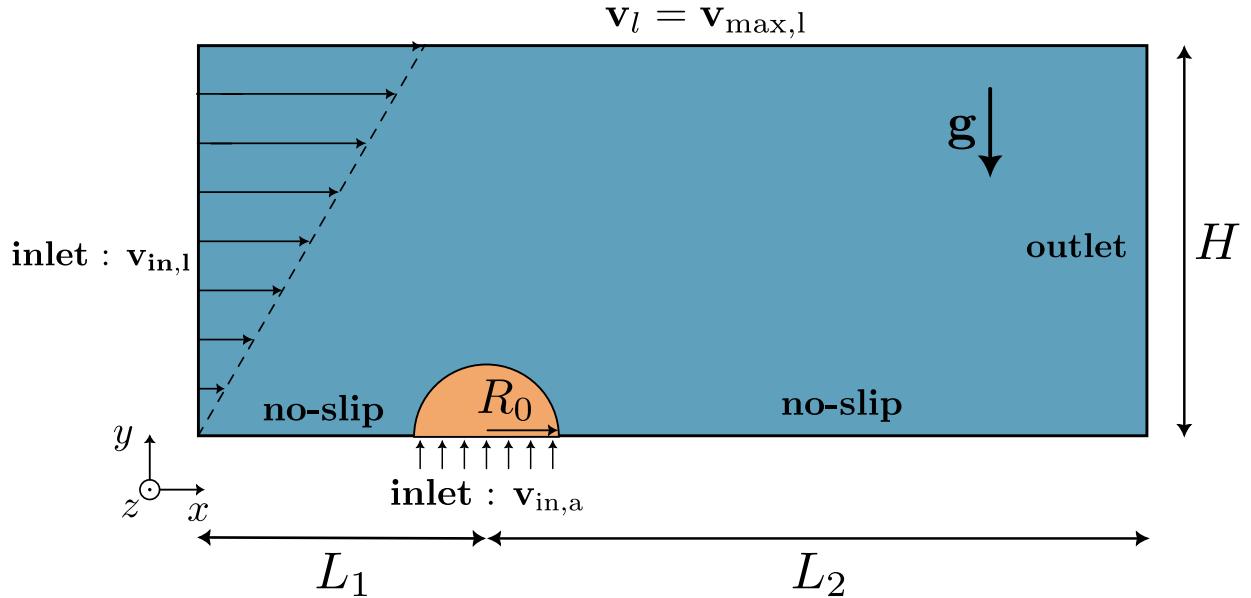


FIGURE 6.28 Schéma d'une coupe 2D dans le plan xy du domaine Ω pour le cas de fluide en mouvement.

Toutes les autres frontières autres que la paroi inférieure ont une condition de flux nul pour la phase et le potentiel chimique.

On initialise le champ de phase comme suit :

$$\phi_0(x, y, z) = -\tanh\left(\frac{R_0 - \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \quad (6.28)$$

Le potentiel chimique est initialisé à $\eta = 0$ dans tout Ω . Cette fois, la vitesse est initialisée comme suit : $\mathbf{v}_{0,l}(y) = v_{\text{max},l} \frac{y}{H} \mathbf{e}_x$

Paramètres communs

Les propriétés physiques étudiées dans le balayage paramétrique sont présentées ci-dessous :

- Taux de cisaillement $S \in \{0, 100, 200, 300, 450\}$. On déduit du taux de cisaillement la vitesse $\mathbf{v}_{\max,l}$ de la paroi supérieure du domaine par la relation suivante : $S = \frac{|\mathbf{v}_{\max,l}|}{H}$
- Masse volumique du liquide $\rho_l \in \{0.2\rho_w \rho_w, 2.5\rho_w\}$ avec ρ_w la masse volumique de l'eau ($\rho_w = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$)
- Coefficient de tension de surface $\sigma \in \{0.2\sigma_w \sigma_w, 2.5\sigma_w\}$ avec σ_w le coefficient de tension de surface entre l'air et l'eau ($\sigma_w = 0.073 \text{ N.m}^{-1}$).

La masse volumique de l'air reste constante : $\rho_a = 1.23 \text{ kg.m}^{-3}$ ainsi que sa viscosité cinématique : $\nu_a = 1.45 \times 10^{-6} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$. La viscosité cinématique du liquide est fonction de sa masse volumique : $\nu_l = \mu_w/\rho_l$ avec μ_w la viscosité dynamique de l'eau ($\mu_w = 1.00 \times 10^{-3} \text{ Pa.s}$). Dans toutes les simulations, on utilise un pas de temps adaptatif afin de respecter deux contraintes sur le pas de temps Δt :

- Contrainte de temps CFL : on souhaite que le nombre de CFL soit inférieur à 0.9 en tout temps.
- Pas de temps capillaire : ce problème spécifique nécessite de contraindre le pas de temps pour que les dynamiques d'interfaces soient correctement décrites. Le critère dépend des propriétés physiques et numériques, il faut que $\Delta t < \Delta t_\sigma$ le pas de temps capillaire, défini comme suit :

$$\Delta t_\sigma = \sqrt{\frac{(\rho_l + \rho_a)\Delta x^3}{4\pi\sigma}} \quad (6.29)$$

où Δx est le pas d'espace de la simulation, et ρ_l , ρ_a et σ sont des propriétés physiques connues. Ainsi le pas de temps variera selon les cas étudiés.

Étant donné la faible taille des bulles par rapport à la taille du domaine, il faut prendre une valeur adéquate pour l'épaisseur d'interface ε et le coefficient de mobilité D comme cela a été expliqué dans la section 5.2.4. Dans ce cas spécifique où l'on étudie des bulles advectées par un champ de vitesse, Yue et al. [61] donnent un critère plus précis pour la mobilité :

$$D = \frac{(S_l + S_a)R_0\varepsilon}{\sigma} \quad (6.30)$$

où S_l et S_a désignent respectivement les taux de cisaillement dus à l'écoulement de liquide et d'air. S_l est connu car c'est un des paramètres du balayage paramétrique, et on estime $S_a = v_{\text{in},a}/(2R_0)$ qui est le cisaillement moyen dans un écoulement de Poiseuille.

Pour déterminer ε , il faut déterminer le pas d'espace choisi, ce qui est l'objet de la partie suivante. On y déterminera deux valeurs de pas d'espace, une valeur loin de l'interface : $\Delta x_{\text{uniforme}}$ et une valeur proche de l'interface : $\Delta x_{\text{interface}}$. On en déduira la valeur de $\varepsilon = \sqrt{3}\Delta x_{\text{interface}}$.

6.4.4 Analyse de convergence en maillage

Puisque l'on sera amené à faire de nombreuses simulations, il est nécessaire que le maillage soit suffisamment précis pour donner des résultats adéquats (en comparant aux résultats de Mirsandi et al. [10]) tout en étant suffisamment grossier pour économiser du temps et des ressources de calcul. Pour déterminer la taille de maille correspondant à ce *juste milieu*, on effectue une analyse de convergence en maillage. Cela consiste à simuler plusieurs fois le même cas avec des niveaux de raffinement différents. Avec ces simulations, on regarde l'évolution d'une quantité d'intérêt qui évolue avec le raffinement du maillage, et qui devrait converger vers une certaine valeur, non connue a priori. Quand la variation de la quantité d'intérêt devient suffisamment faible -à la discréption de l'utilisateur- entre deux niveaux de raffinement, c'est signe que l'on a atteint un régime asymptotique. On choisit en général l'avant-dernier niveau de raffinement, étant entendu que la variation de la quantité d'intérêt est trop faible par rapport au coût de calcul supplémentaire.

Dans le problème étudié ici, on a choisi le cas le plus contraignant pour faire l'analyse de convergence de maillage et on s'intéresse au temps de détachement t_{det} défini tel qu'à l'instant $t_{\text{det}} + \Delta t$, on observe que la bulle s'est décrochée. Puisque l'on utilise un maillage raffiné automatiquement, on fait simplement varier le nombre de raffinements uniformes, tout en gardant le même nombre de niveaux de raffinement supplémentaires à l'interface. Par exemple, le premier niveau de raffinement correspond à 1 raffinement uniforme du domaine avec 3 niveaux de raffinement supplémentaires à l'interface.

Pour déterminer automatiquement le détachement, un critère sur la dérivée de l'aire du contour de la bulle a été utilisé. En effet, au moment du détachement, on devrait observer une brusque variation de cette dérivée vers des valeurs négatives. Comme dans une instabilité de Rayleigh-Plateau, une interface qui s'étire trop est défavorable du point de vue énergétique, le système va donc chercher à réduire les surfaces de contact, ce qui provoque la rupture. Ce critère a permis de déterminer avec succès les temps de détachement pour les différents niveaux de raffinement étudiés, comme en témoigne la Figure 6.29. On agrandit la Figure 6.29 à la Figure 6.30 pour mieux visualiser le pic de la dérivée de l'aire du contour au moment du détachement.

De plus, on voit à la Figure 6.31 (agrandissement à la Figure 6.32) qu'un niveau de raffinement trop faible entraîne une perte de volume par diffusion de la phase gazeuse dans la phase liquide, ce qui nous impose d'en choisir un suffisamment élevé. On représente à la Figure 6.33 une coupe du contour de la bulle au moment du détachement pour les différents niveaux de raffinement proposés et l'on constate que le point de rupture semble converger vers une solution. En témoignent en effet le rapprochement entre deux points de rupture à deux

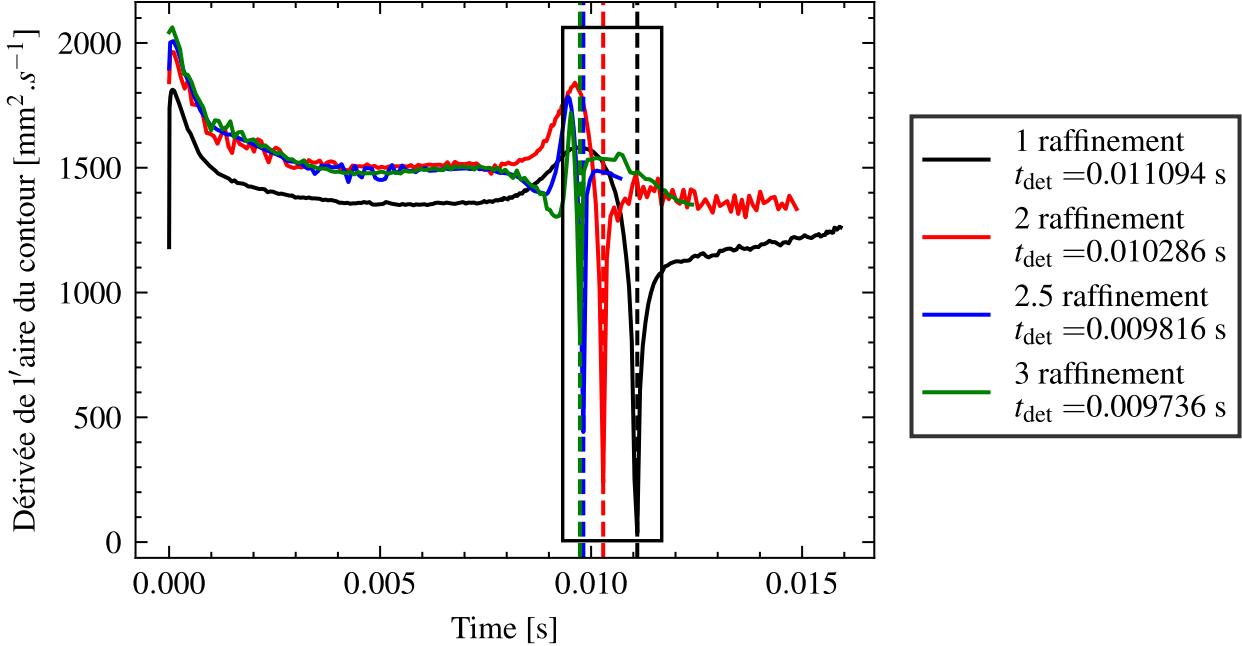


FIGURE 6.29 Évolution de la dérivée de l'aire du contour de la bulle au cours du temps pour différents niveaux de raffinement. Le détachement de la bulle se produit au temps t_{det} qui correspond au minimum de la dérivée

niveaux de raffinement différents, ce qui est très visible entre les niveaux 2.5 et 3 par exemple. Néanmoins, on note que les formes des bulles au moment du détachement diffèrent des formes obtenues par Mirsandi et al. représentées à la Figure 6.34, le pincement au moment de la rupture est beaucoup plus prononcé. On représente les temps de détachement et les volumes au détachement en fonction du pas d'espace Δx aux Figures 6.35 et 6.36. Sur les mêmes figures sont présentes les valeurs obtenues par Mirsandi et al. après son analyse de convergence de grille.

Le maillage choisi est celui correspondant au niveau de raffinement 2.5 qui est un bon compromis entre précision et ressources de calcul nécessaires. On observe en effet une faible variation des quantités d'intérêt entre les niveaux 2.5 et 3 : 0.8% d'écart sur t_{det} et 0.1% d'écart sur V_{det} . Ceci correspond à $\Delta x_{\text{uniforme}} = 1.95 \times 10^{-1}$ mm et $\Delta x_{\text{interface}} = 2.43 \times 10^{-2}$ mm. Ceci donne une épaisseur d'interface $\varepsilon = \sqrt{3}\Delta x_{\text{interface}} = 4.23 \times 10^{-2}$ mm qui nous permet ensuite de déterminer D selon l'équation (6.30).

Les auteurs de l'article ont choisi $\Delta x_{\text{Mirsandi}} = 8 \times 10^{-2}$ mm qui est plus fin que le pas d'espace uniforme choisi pour nos simulations. Néanmoins, puisqu'on utilise de l'adaptation de maillage, on s'attend à avoir des résultats concordant, puisque l'essentiel se passe aux interfaces, où les cellules sont plus raffinées.

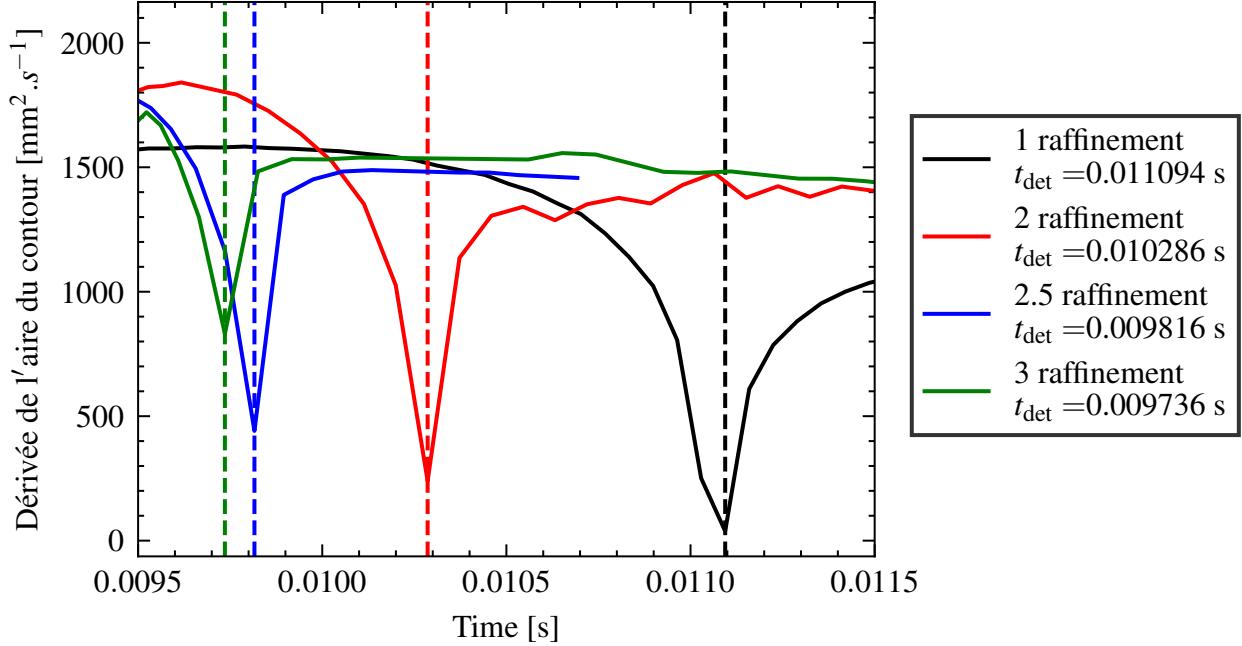


FIGURE 6.30 Agrandissement de la Figure 6.29 autour du temps de détachement t_{det} . Correspond à la zone encadrée en noir dans la figure originelle.

6.4.5 Résultats

Dans cette section, on présente les résultats obtenus, d'abord les cas sans cisaillement de liquide où l'on a seulement fait varier les propriétés du liquide environnant, ensuite les résultats avec l'écoulement de cisaillement de différentes intensités.

Fluide au repos

Si le fluide est au repos, seules ses propriétés physiques (densité, coefficient de tension de surface,...) agissent sur le détachement de la bulle, ce qui nous permet d'isoler l'influence des propriétés physiques sur le détachement. On représente aux Figures 6.37 et 6.38 les contours dans le plan xy des bulles au moment de leur détachement en faisant varier la masse volumique du liquide environnant et le coefficient de tension de surface. On compare systématiquement au cas régulier, c'est à dire un liquide environnant qui possède les mêmes propriétés physiques que l'eau. On présente ensuite les temps de détachement et les volumes au détachement dans les tables 6.2 et 6.3. On note que certains résultats ne sont pas disponibles au moment de l'écriture du mémoire par manque de temps, on l'indique par des croix dans les tables. Pour ces résultats, les temps de détachement attendus sont en moyenne 10 fois plus élevés que pour les cas avec le fluide en mouvement, ainsi les simulations deviennent extrêmement longues

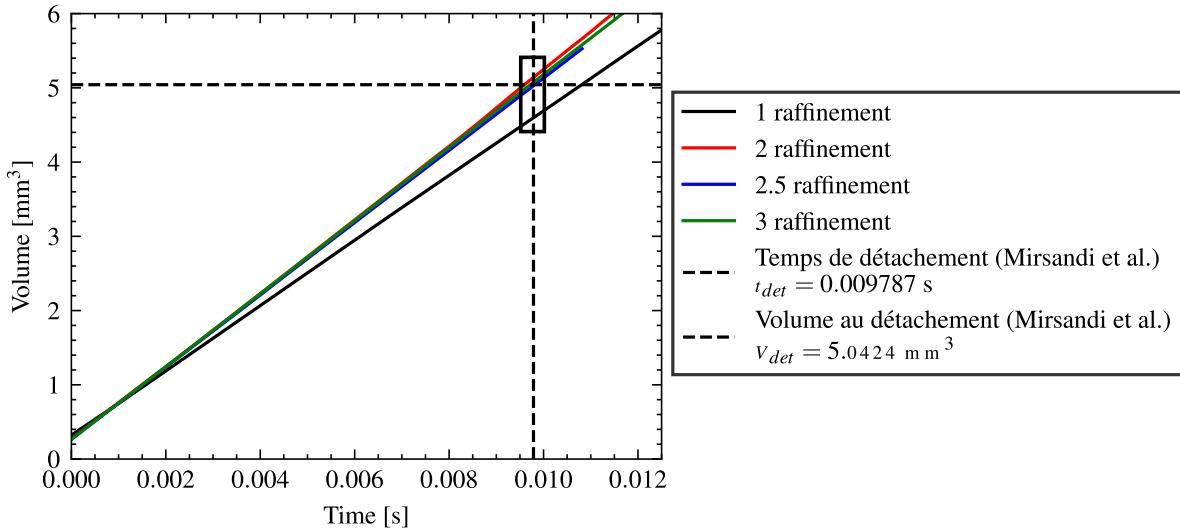


FIGURE 6.31 Évolution du volume de la bulle au cours du temps pour différents niveaux de raffinement. Les lignes pointillées correspondent au volume de la bulle au moment de son détachement prédites par les simulations de Mirsandi et al. On constate qu'un niveau de raffinement trop faible entraîne une perte de volume de la bulle car celle-ci diffuse dans le liquide environnant.

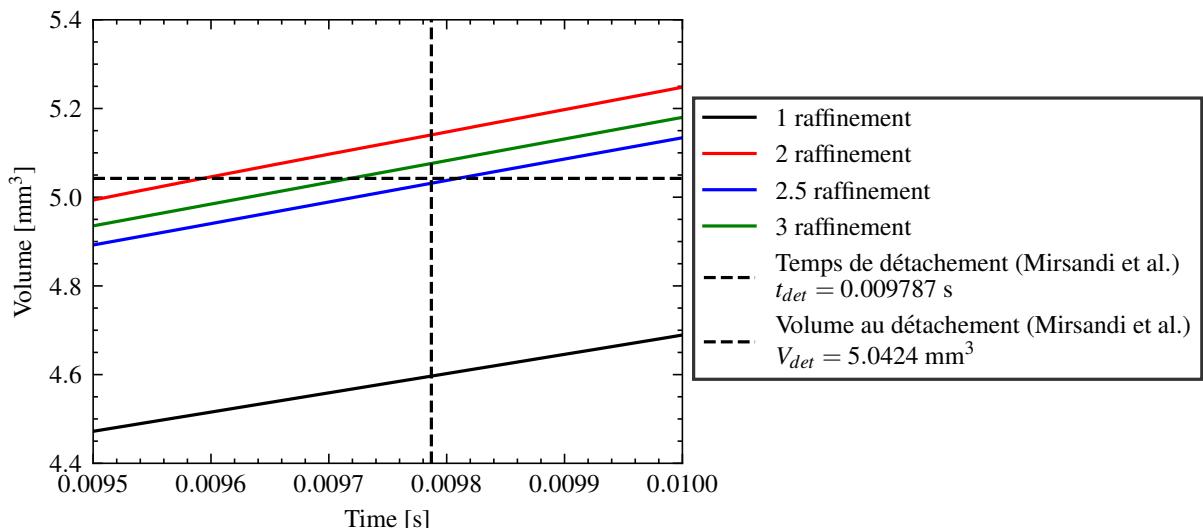


FIGURE 6.32 Agrandissement de la Figure 6.31 autour du temps de détachement t_{det} . Correspond à la zone encadrée en noir dans la figure originelle.

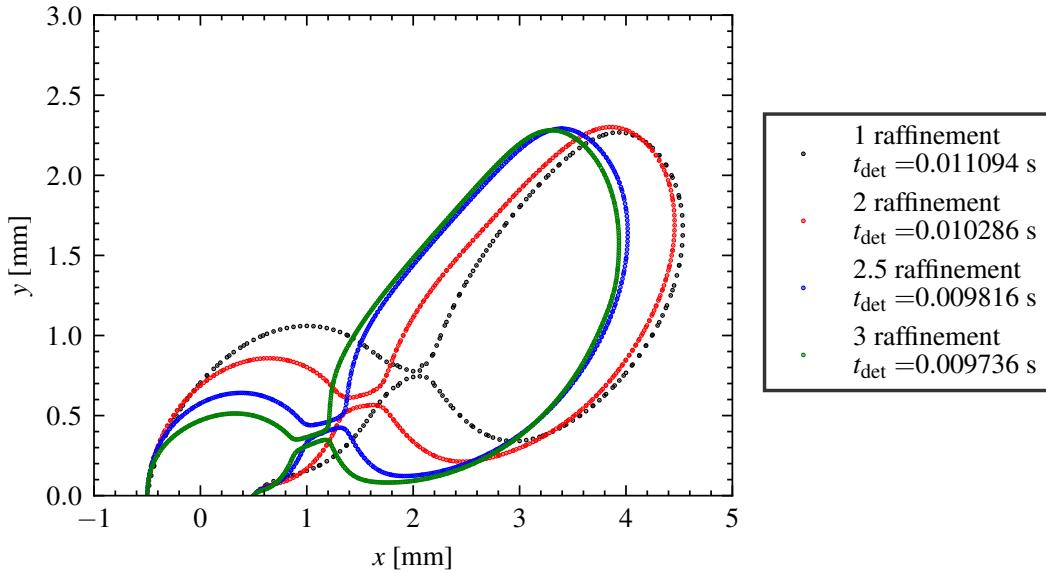


FIGURE 6.33 Représentation d'une coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour différents niveaux de raffinement. On constate que le point de détachement se rapproche d'une valeur asymptotique.

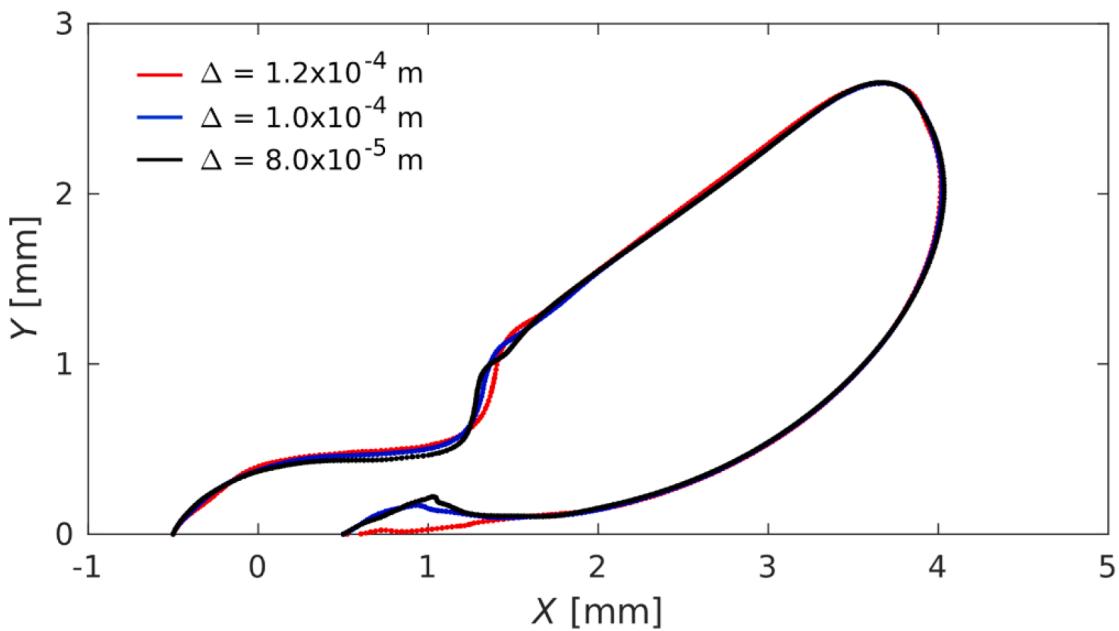


FIGURE 6.34 Coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour les résultats de Mirsandi et al. utilisant les mêmes débits et propriétés physiques. Tiré directement de [10] sous licence Creative Commons CC-BY.

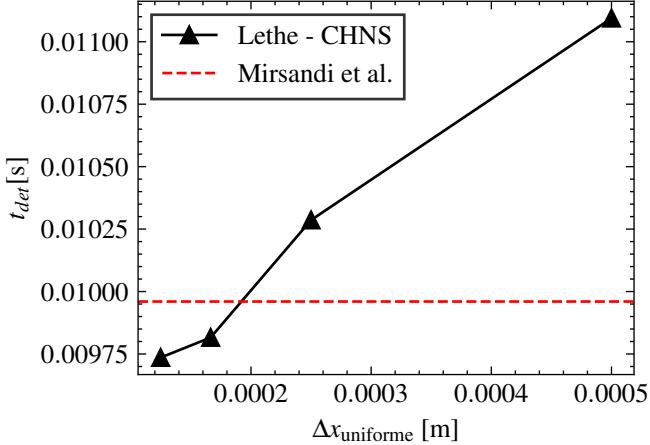


FIGURE 6.35 Évolution du temps de détachement t_{det} en fonction du pas d'espace Δx , on observe que l'on tend vers une valeur limite pour des niveaux de raffinement de plus en plus élevés.

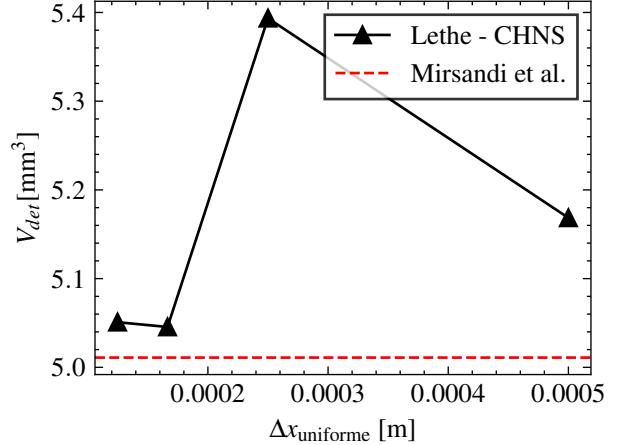


FIGURE 6.36 Évolution du volume au détachement V_{det} en fonction du pas d'espace Δx , on observe que l'on tend vers une valeur limite pour des niveaux de raffinement de plus en plus élevés.

à cause de la contrainte de pas de temps capillaire, ce qui implique un très grand nombre d'itérations.

On observe que les temps de détachement sont inversement proportionnels à la masse volumique du liquide environnant et proportionnel au coefficient de tension de surface. Ce résultat n'est pas surprenant pour la masse volumique car l'un des mécanismes qui provoque le détachement de la bulle est le fait qu'elle soit tirée vers le haut par la poussée d'Archimède, dont l'intensité est directement proportionnelle à la masse volumique du liquide. C'est l'analyse présentée dans [10] qui concorde tout à fait avec les résultats expérimentaux et numériques.

La dépendance du temps de détachement au coefficient de tension de surface mérite qu'on s'y attarde un peu plus. Plus ce coefficient est élevé, moins la bulle aura tendance à se déformer, car cela serait très défavorable d'un point de vue énergétique. Les auteurs de [10] décrivent la tension de surface comme la force qui maintient la bulle accrochée à l'orifice de sortie de l'air. Ainsi, pour provoquer le détachement d'une bulle ayant un coefficient σ élevé il faut appliquer

TABLEAU 6.2 Temps de détachement et volume au détachement pour différentes valeurs du coefficient de tension de surface (σ) dans un fluide au repos.

σ	$0.2\sigma_w$	σ_w	$2.5\sigma_w$
t_{det} (s)	0.026	0.060	0.143
V_{det} (mm ³)	12.7	28.3	60.473

TABLEAU 6.3 Temps de détachement et volume au détachement pour différentes valeurs de masse volumique (ρ_l) dans un fluide au repos.

ρ_l	$0.2\rho_w$	ρ_w	$2.5\rho_w$
t_{det} (s)	X	0.060	0.026
V_{det} (mm ³)	X	28.3	16.3

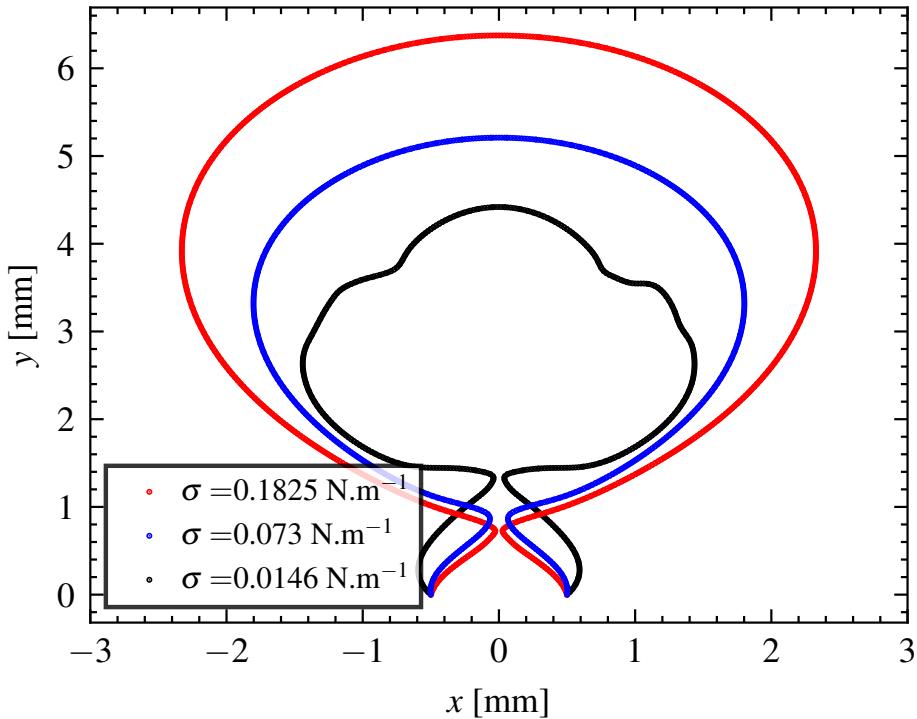


FIGURE 6.37 Représentation d'une coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour différentes valeurs de σ sans écoulement cisaillant. On observe des déformations plus importantes pour des faibles valeurs de σ .

une force qui est supérieure à la force de détachement pour une bulle standard. Puisque la seule force en présence dans notre cas est la poussée d'Archimède, il faut donc un volume plus important pour avoir une force d'intensité plus élevée, ce qui explique le retardement du temps de détachement. Si l'on regarde les contours des bulles (Figure 6.37) pour lesquelles on a fait varier σ , on observe bien la tendance (ou non) de la bulle à se déformer selon la valeur du coefficient de tension de surface.

La forme singulière du contour pour le cas $\sigma = 0.25\sigma_w$ observée à la Figure 6.37 est due à la déformation de la surface de la bulle sous l'action du jet de gaz qui se forme au moment du détachement. On représente ce phénomène en visualisant le contour en 3D et en montrant les champs de vitesse dans le plan xy à la Figure 6.39. La vitesse donnée sur la Figure 6.39

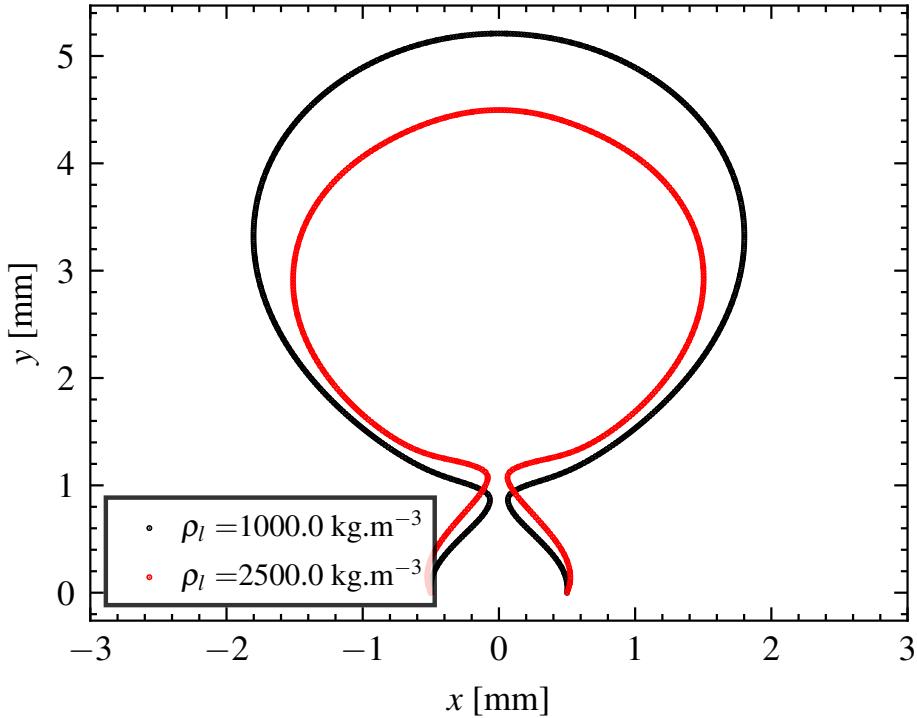


FIGURE 6.38 Représentation d'une coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour différentes valeurs de ρ_l sans écoulement cisaillant.

est en $\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$. Ce phénomène se produit dans tous les cas étudiés, mais on n'observe son effet que dans ce cas particulier. On explique ce phénomène par le rétrécissement de l'aire de la section traversée par le flux de gaz. Puisque le débit est conservé, une section de passage plus petite implique une vitesse plus grande, ce qui se traduit par l'apparition d'un jet de gaz au moment du détachement. Une fois la bulle brisée en deux parties distinctes, le champ de vitesse revient à la normale après un bref rebond lié à l'énergie élastique de la bulle qui est libérée sous forme d'énergie cinétique, à la manière d'un élastique tendu qui serait rompu en son milieu.

Fluide en mouvement

La section précédente nous a permis d'isoler la contribution des propriétés physiques au temps de détachement et volumes au détachement, on peut donc s'attaquer au rôle joué par le mouvement du fluide environnant sur ces mêmes quantités d'intérêt.

Dans un premier temps, on compare les résultats obtenus par le solveur CHNS implanté dans Lethe aux résultats de Mirsandi et al. pour des propriétés régulières, c'est à dire que les propriétés physiques de la phase liquide sont celles de l'eau, et on fait varier le taux de

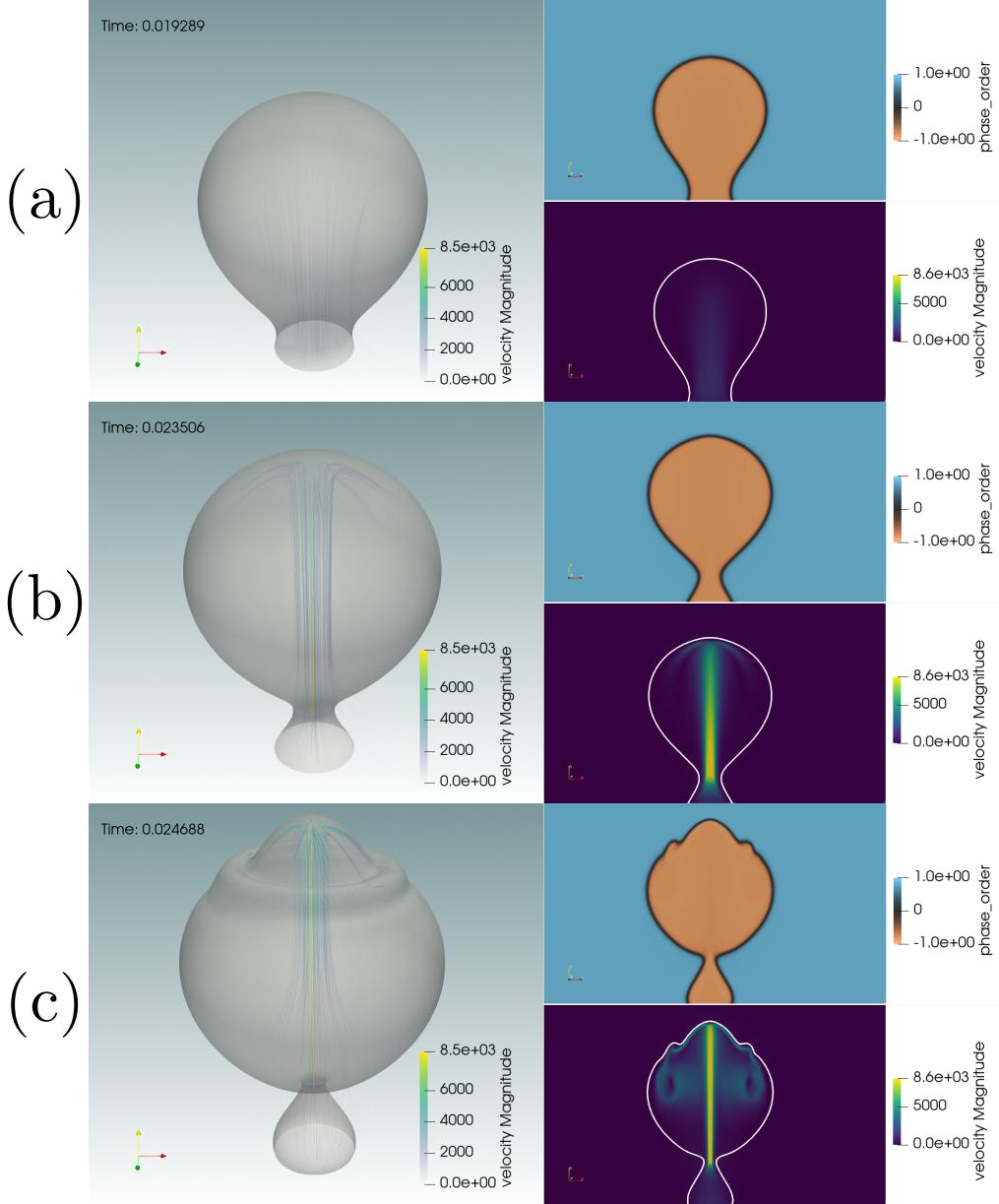


FIGURE 6.39 Représentation du système physique correspondant au cas $\sigma = 0.25\sigma_w$ sans écoulement cisailant à différents instants t : $t = 0.019289$ (a), $t = 0.023506$ (b), $t = 0.024688$ (c). On voit que l'intensité du champ de vitesse augmente lorsqu'approche le moment du détachement car la section de passage du gaz devient de plus en plus étroite ce qui entraîne la formation du jet. Puisque σ est peu élevé, la surface de la bulle se déforme facilement sous l'action du jet.

cisaillement entre 0 s^{-1} et 450 s^{-1} . On représente l'évolution du temps de détachement et du volume au décollement aux Figures 6.40 et 6.41. On représente sur un même graphique les contours dans le plan xy des bulles pour les différents taux de cisaillement simulés au

moment du décollement à la Figure 6.42. Comme pour la partie précédente certains résultats ne sont pas disponibles au moment de l'écriture du mémoire par manque de temps.

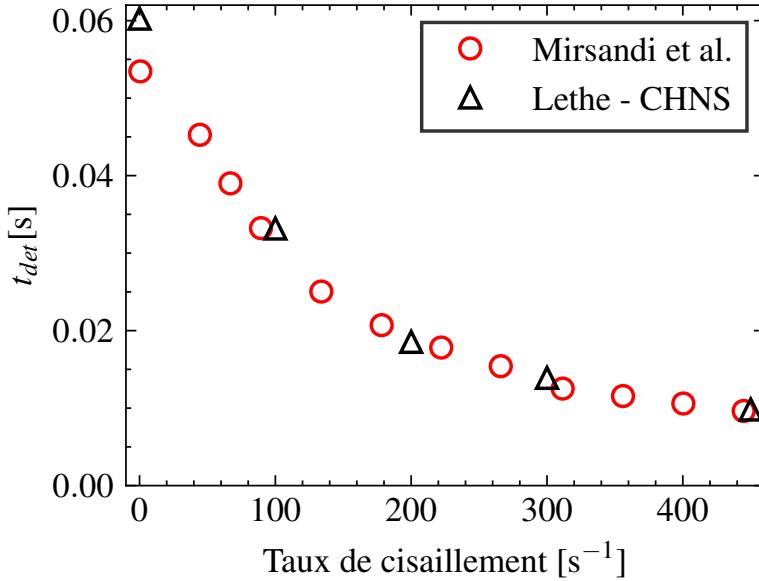


FIGURE 6.40 Comparaison des temps de détachement pour différents taux de cisaillement entre les résultats du modèle CHNS implémenté dans Lethe (en noir) et les résultats du modèle LFRM implanté par Mirsandi et al. (en rouge) Les propriétés du fluide sont celles de l'eau : $\rho_l = \rho_w = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ et $\sigma = \sigma_w = 0.073 \text{ N.m}^{-1}$

On observe un très bon accord des résultats, qui suivent bien la tendance observée dans l'article original : l'augmentation du taux de cisaillement, en augmentant la vitesse du fluide entraîne une diminution du temps de détachement, et par conséquent du volume au détachement.

C'est bien le résultat attendu puisqu'une vitesse plus élevée du fluide entraîne un gradient de vitesse plus important à l'interface, donc des frottements visqueux plus intenses, comme décrit par Mirsandi et al. [10]. La bulle est alors "tirée" dans la direction du fluide, ce qui a tendance à déformer la bulle dans la direction du fluide. Ces effets s'ajoutent à la poussée d'Archimède et provoquent une rupture anticipée de la bulle, par comparaison aux cas de fluide au repos. On retrouve de plus une inclinaison de la bulle croissante comme observée par Mirsandi et al. On note que, tous les résultats, sauf le cas sans écoulement cisaillant sont en accord avec ceux des auteurs. En effet, quand $S = 0 \text{ s}^{-1}$, le temps de détachement, et donc le volume au détachement sont légèrement sur-évalués. Cela pourrait être dû à une sous-évaluation

On effectue ensuite le balayage paramétrique décrit dans l'introduction de cet exemple, en

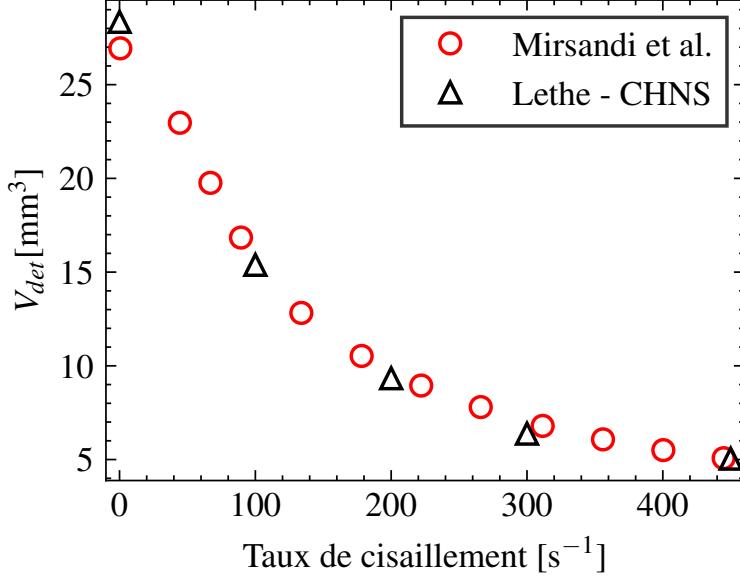


FIGURE 6.41 Comparaison des volumes au détachement pour différents taux de cisaillement entre les résultats du modèle CHNS implémenté dans Lethe (en noir) et les résultats du modèle LFRM implémenté par Mirsandi et al. (en rouge). Les propriétés du fluide sont celles de l'eau : $\rho_l = \rho_w = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ et $\sigma = \sigma_w = 0.073 \text{ N.m}^{-1}$.

inclus dans les graphiques les résultats des cas sans cisaillement pour que nos graphiques soient complets. On représente à la Figure 6.43 et 6.44 les temps de détachement et les volumes au détachement des bulles observés. Comme mentionné dans la méthodologie de l'exemple, les résultats ne sont pas directement comparables -comme le cas régulier l'était- aux résultats de Mirsandi et al. En effet, le débit d'air entrant que l'on utilise ($Q = 5.00 \times 10^2 \text{ mm}^3\text{s}^{-1}$) est différent de celui utilisé dans le balayage paramétrique de l'article ($Q = 1.67 \times 10^2 \text{ mm}^3\text{s}^{-1}$). Le débit d'air de l'analyse de convergence en maillage effectuée précédemment a été gardé pour des raisons de cohérence. On montre aussi les contours de bulles au moment du détachement dans le plan xy en fonction du taux de cisaillement, ce qui nous permet de comparer directement au cas régulier.

Les résultats sont très satisfaisant et, bien qu'ils ne soient pas directement comparables, on retrouve bien les mêmes tendances dans l'évolution des temps de détachement et des volumes au détachement. En particulier, les Figures 6.42, 6.45 et 6.46 montrent bien l'action du fluide sur le détachement des bulles telle que décrite dans la conclusion de [10]. La force de frottement (force de traînée dans l'article original) agit en aplatisant les bulles et en provoquant la rupture anticipée au point de rupture, ce qui diminue les temps de détachement et donc les volumes au détachement. En outre il est observé, tant dans les simulations de [10] que dans celles du solveur Lethe, que "*l'influence des propriétés du fluide sur les caractéristiques*

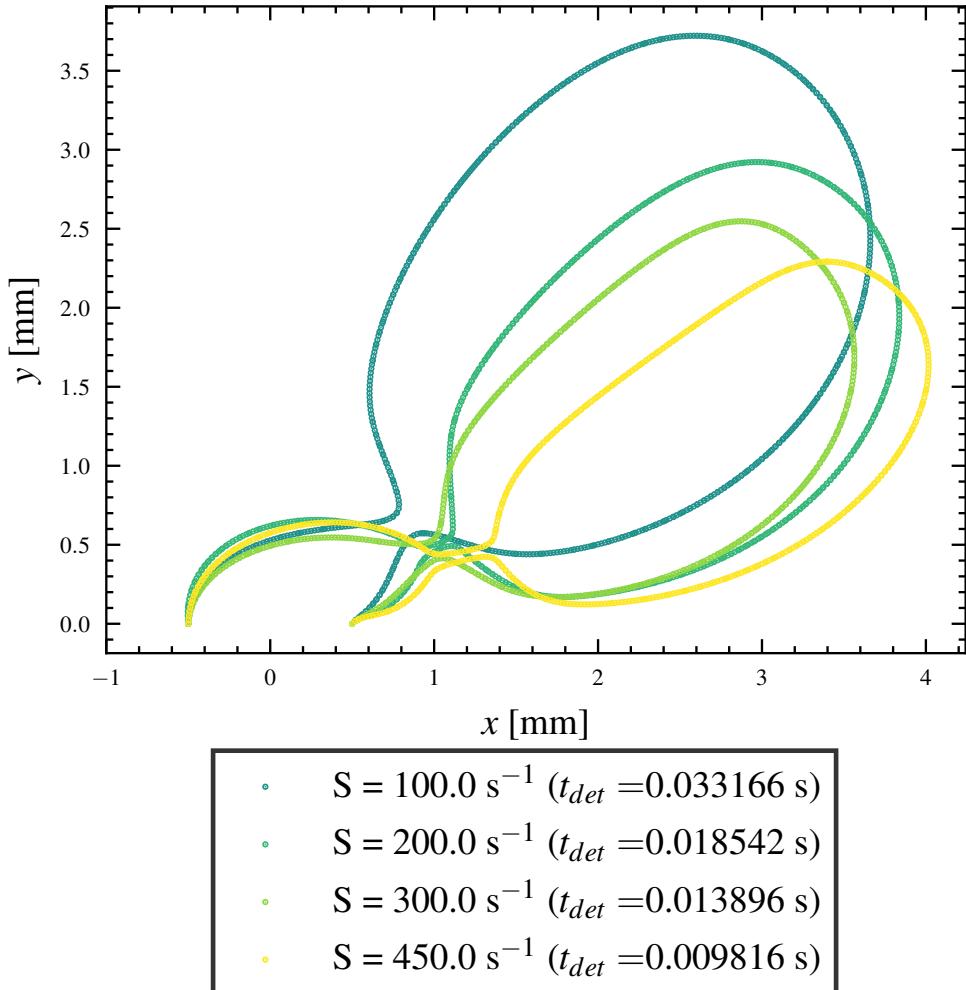


FIGURE 6.42 Représentation d'une coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour différents taux de cisaillement S . Un taux de cisaillement élevé signifie une vitesse élevée du fluide, ce qui a tendance à emmener la bulle dans son mouvement. D'où l'augmentation d'inclinaison observée avec l'augmentation de S . Les propriétés du fluide sont celles de l'eau : $\rho_l = \rho_w = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ et $\sigma = \sigma_w = 0.073 \text{ N.m}^{-1}$

du détachement des bulles deviennent moins prononcées, surtout pour des taux de cisaillement élevés" (traduit directement de [10] : [...] the influence of fluid properties on the bubble detachment characteristics becomes less pronounced, especially at higher shear rates.).

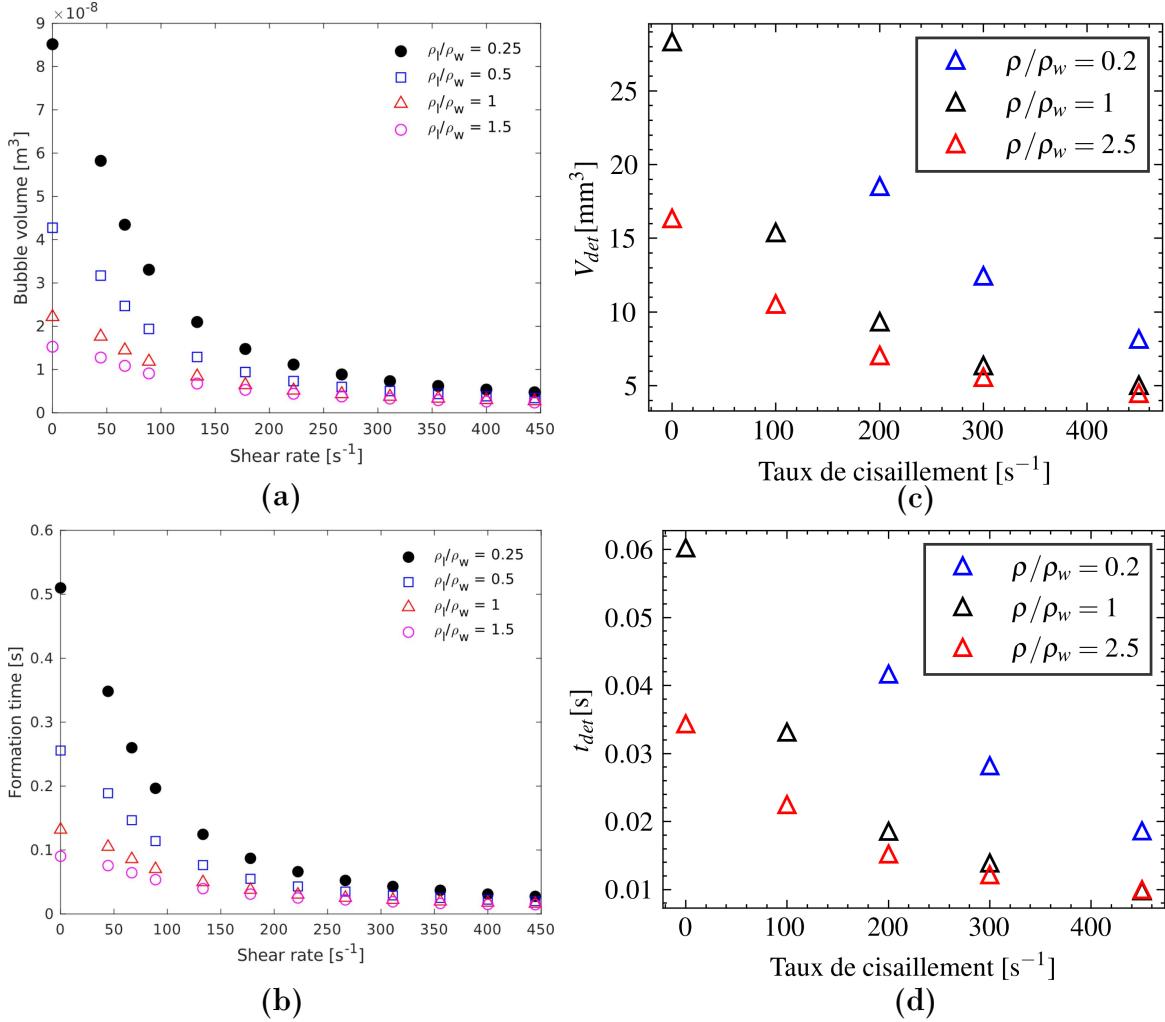


FIGURE 6.43 Comparaison des résultats de temps de détachement (a) et volumes de détachement (b) Mirsandi et al. [10] (sous license Creative Commons CC-BY) utilisant un débit d'air $Q = 1.67 \times 10^2 \text{ mm}^3 \text{s}^{-1}$ (à gauche) aux résultats du solveur CHNS de Lethe (c) et (d) qui utilise un débit d'air $Q = 5.00 \times 10^2 \text{ mm}^3 \text{s}^{-1}$ (à droite) pour différentes valeurs de ρ_l . Certains résultats ($S = 0 \text{ s}^{-1}$ et $S = 100 \text{ s}^{-1}$) sont manquants par manque de temps.

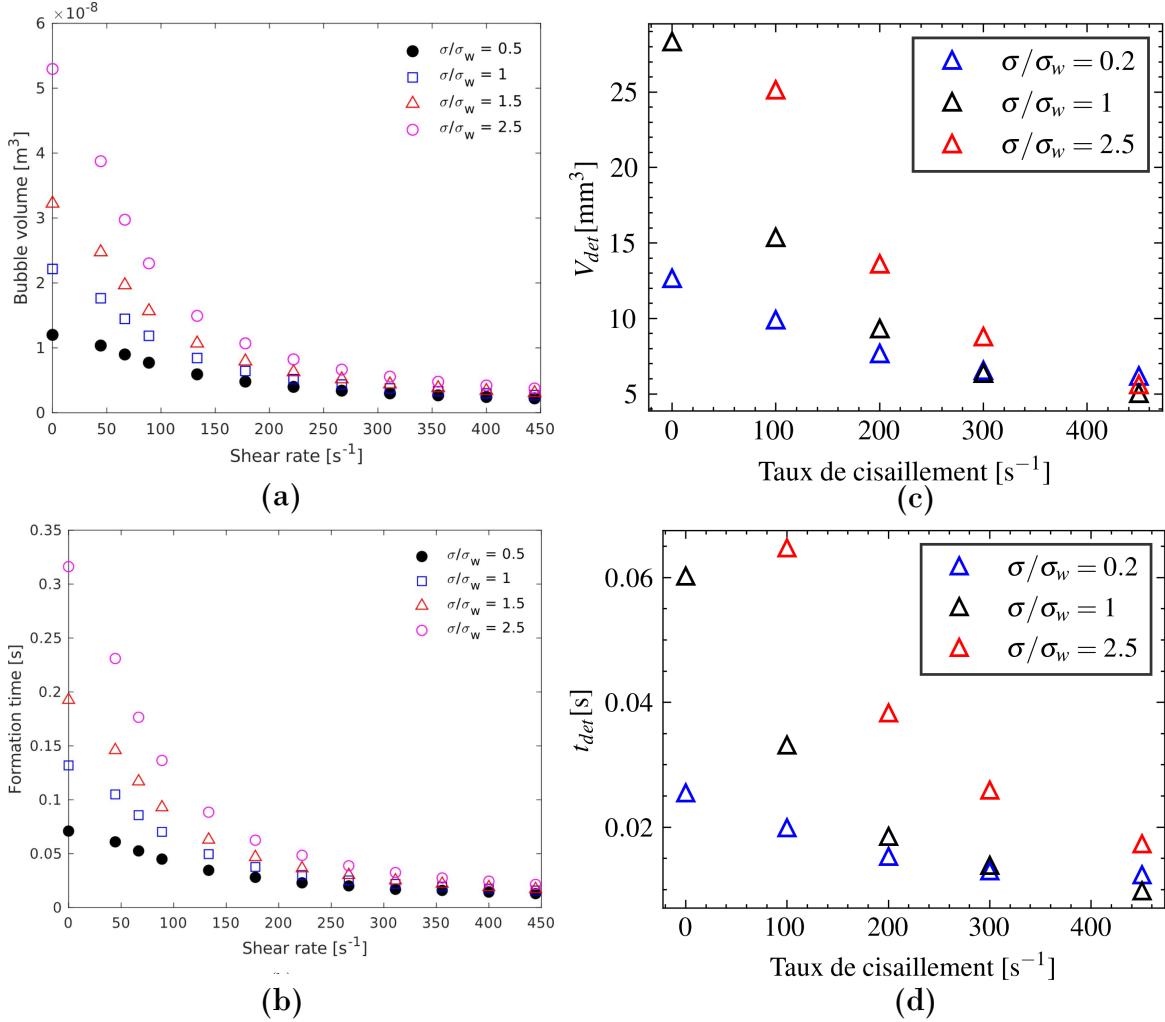


FIGURE 6.44 Comparaison des résultats de temps de détachement (a) et volumes de détachement (b) Mirsandi et al. [10] (sous license Creative Commons CC-BY) qui utilise un débit d'air $Q = 1.67 \times 10^2 \text{ mm}^3 \text{s}^{-1}$ (à gauche) aux résultats du solveur CHNS de Lethe (c) et (d) qui utilise un débit d'air $Q = 5.00 \times 10^2 \text{ mm}^3 \text{s}^{-1}$ (à droite) pour différentes valeurs de σ . Certains résultats ($S = 0 \text{ s}^{-1}$) sont manquants par manque de temps.

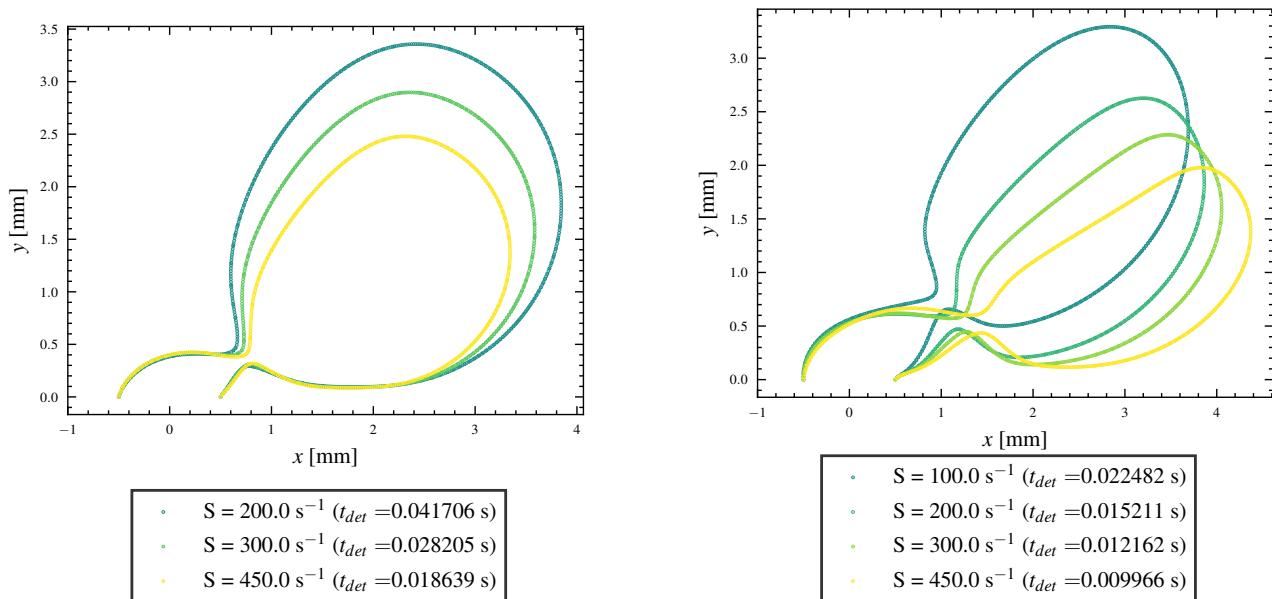


FIGURE 6.45 Coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour $\rho_l = 0.2\rho_w$ (a) et $\rho_l = 2.5\rho_w$ (b)

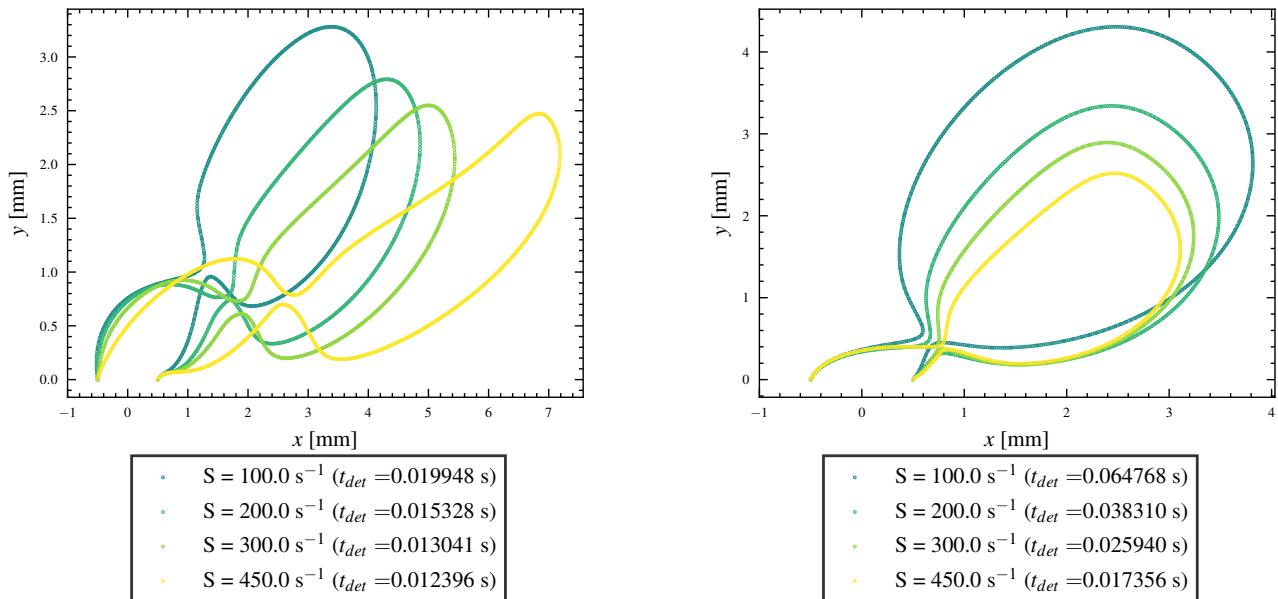


FIGURE 6.46 Coupe 2D selon le plan xy du contour de la bulle au moment du détachement pour $\sigma = 0.2\sigma_w$ (a) et $\sigma = 2.5\sigma_w$ (b)

CHAPITRE 7 DISCUSSION GÉNÉRALE

Dans cette partie, on résume les forces et faiblesses identifiées pour l'utilisation des équations couplées de Cahn-Hilliard-Navier-Stokes pour la simulation d'écoulements polyphasiques.

7.1 Forces du modèle CHNS

Le principe physique de minimisation de l'énergie libre sur lequel sont basées les équations de Cahn-Hilliad permet au modèle de traiter naturellement les dynamiques d'interface complexes rencontrées dans les problèmes traités. En effet, les phénomènes de rupture et de coalescence sont facilement interprétables du point de vue de la minimisation de l'énergie. Les résultats obtenus témoignent bien de cela, notamment si l'on regarde les simulations de décollement de bulles effectuées, le modèle est bien capable de traiter ces changements topologiques complexes. De même, l'enrichissement de l'équation du champ de phase par l'équation du potentiel chimique permet d'introduire aisément des conditions aux frontières portant sur les flux de phase aux paroi ($\nabla\phi \cdot \mathbf{n}$). Ainsi, des conditions d'angle de contact sont facilement implantables et leur bon fonctionnement a été démontré par le cas test de la loi de Jurin. Ce dernier test démontre notamment que le modèle permet de simuler le mouvement d'une ligne de contact. Tout ceci fait du modèle CHNS un bon choix pour des problèmes de microfluidique polyphasique par exemple, qui sont principalement dominés par des effets capillaires. Naturellement, les problèmes présentant des changements topologiques intenses tels que les écoulements polyphasiques liquide-gaz sont très bien simulés grâce au modèle, comme il a été démontré dans ce projet. Il faut cependant garder à l'esprit les limitations trouvées par Yue et al. [61] et s'assurer qu'aucun fluide n'est présent démesurément en excès, auquel cas aucun paramétrage ne permettra d'obtenir des résultats cohérents.

D'un point de vue numérique maintenant, la présence d'un terme diffusif facilite énormément la résolution des problèmes et stabilise les équations, ce qui rend le modèle très attractif. On ne rencontre donc pas les difficultés habituelles quand on résout numériquement des équations d'advection pure, ce qui évite d'utiliser les techniques de stabilisation telles que celles employées dans les équations de Navier-Stokes. Ceci presuppose néanmoins le bon réglages des paramètres du systèmes : l'épaisseur d'interface ε et le coefficient de mobilité D .

7.2 Faiblesses du modèle CHNS

À l'heure actuelle, le plus grand défaut du modèle reste le paramétrage incertain de ε et D . Même si les travaux de Jacqmin [63] et de Yue et al. [61] ont été très éclairant pour la compréhension du sujet, le réglage des constantes reste extrêmement dépendant du problème et c'est à l'utilisateur de *faire fonctionner* le modèle. Lorsque la solution est connue, il est possible d'affiner les paramètres jusqu'à avoir des résultats cohérents, mais si l'on en vient à résoudre des problèmes industriels, dont on ne connaît pas nécessairement la solution, alors tout devient plus délicat. Il serait correct de dire que l'expérimental est plus éclairant pour le modèle CHNS que le modèle ne l'est pour l'expérimental. La paramétrage correct de ε et D est d'autant plus difficile que ce sont des paramètres que l'on pourrait qualifier de *physico-numériques* : on peut leur donner un sens physique mais les valeurs correctes qui permettent d'obtenir des résultats cohérents sont obtenues par des considérations numériques. Par exemple, le fait que D doive être adapté afin de conserver la masse du système, ou le fait que l'épaisseur d'interface ε soit bien plus grande que les vraies interfaces. Bien que le modèle CHNS soit tout à fait capable de reproduire des simulations polyphasiques, c'est une utilisation qui va au-delà du cadre théorique initial dont les équations sont dérivées. Ainsi, c'est peut-être la raison pour laquelle il est difficile de comprendre comment bien paramétrier ε et D , car on utilise les équations de Cahn-Hilliard de manière impropre.

Un deuxième défaut que l'on peut trouver à ce modèle est le coût en calcul supplémentaire pour résoudre un système à deux équations, plutôt qu'une seule pour les modèles à interface diffuse classique. Il est clair que cela pose des problèmes d'extensibilité pour des problèmes de très grande envergure. Ceci ne tient cependant pas compte du besoin de procédures de reconstruction ou de redistanciation des modèles VOF ou LS, aussi cette question reste ouverte.

On conclut en évoquant la pluralité des formulations existantes pour le modèle de Cahn-Hilliard, et *a fortiori* du modèle CHNS : chacun semble avoir leur utilité et leur contexte d'utilisation propre. Un travail d'unification est encore nécessaire pour rendre le système CHNS plus abordable et attractif pour la simulation fluide polyphasique.

CHAPITRE 8 CONCLUSION

Dans cette partie, on revient sur les travaux effectués au cours du projet, avant d'en cerner les limites, ce qui amènera à l'exposé de travaux futurs pour l'amélioration du travail. Un dernier paragraphe viendra conclure tout le projet

8.1 Synthèse des travaux

La genèse de ce projet était de trouver un modèle à interface diffuse, de l'implémenter et de l'étalonner, en vue de simuler des écoulements polyphasiques. Après la revue de littérature, le choix des équations de Cahn-Hilliard couplées aux équations de Navier-Stokes a semblé être une excellente piste, tant pour son fondement théorique solide que pour sa relative facilité d'implémentation numérique. Puisque la méthode des éléments finis a été choisie, les formulations faibles et les résolutions des problèmes non-linéaires subséquents ont été écrites afin d'implémenter le système couplé dans Lethe. On a d'ailleurs largement profité du solveur Navier-Stokes déjà existant, ainsi le couplage s'est fait sans heurts, validant ainsi le sous-objectif **S.O 2**. Des premiers tests ont été effectués, permettant de vérifier l'implémentation du système Cahn-Hilliard seul, grâce à la méthode des solutions manufacturées et d'un *benchmark* qualitatif de décomposition spinodale, ce qui valide le sous-objectif **S.O 1**. Finalement, les multiples cas test présentés ainsi que le cas industriel de décollement de bulles en flux de cisaillement ont permis de conclure sur les performances du modèle CHNS. En particulier, le modèle CHNS a montré d'excellentes performances sur des cas impliquant des mécanismes liés à la tension de surface. Ces tests ont aussi éclairé la compréhension du modèle, notamment ses forces et faiblesses par rapport à d'autres modèles existants et le réglage subtil de ses paramètres. (sous-objectif **S.O 3**).

La vérification du modèle CHNS est en soi une contribution scientifique, notamment pour les exemples d'instabilité de Rayleigh-Taylor, de rupture de digue et de bulle montante où l'on a pu comparer avec le modèle VOF implanté dans la même architecture logicielle. C'est donc une vraie comparaison d'un modèle à l'autre.

On ajoute que tous les codes ainsi que la documentation ont été ajoutés au code source de Lethe, et donc accessibles en ligne sur la page *Github* de notre laboratoire : [lethe-cfd](#).

8.2 Limitations de la solution proposée

De nombreuses questions restent en suspens pour comprendre de manière complètement satisfaisante le modèle CHNS. Par exemple, l'impact du choix du modèle de mobilité n'a pas clairement été établi. Dans ce travail, seule une mobilité constante a été considérée, ce qui implique que la diffusion se fait sans prendre en compte le champ de phase local. Selon Lovrić et al. [47] différents modèles de mobilités peuvent produire des résultats très différents sur des maillages grossiers. Ainsi, les résultats pourraient n'être pas complètement exacts à cause du choix de la mobilité.

De plus, l'utilisation du modèle CHNS reste pour le moment non-triviale et demande certaines connaissances sur les problèmes pour le paramétrier adéquatement. Il serait nécessaire de dériver une expression de la mobilité dépendant uniquement des variables locales (ou globales) telles que l'amplitude du champ de vitesse par exemple.

À ceci, on ajoute que l'initialisation du champ de phase reste maladroite car on doit injecter *à la main* le profil en tangente hyperbolique initial. C'est une source fréquente d'erreur et a été la cause de nombreuses simulations lancées sans succès au cours de ce travail. Ainsi un travail de simplification reste à faire, on pense notamment que la projection d'un profil initial entré par l'utilisateur dans l'espace de solution pourrait régler ces problèmes.

8.3 Améliorations et travaux futurs

Parmi les limitations présentées dans la partie précédente, le paramétrage du coefficient de mobilité semble être le problème principal à résoudre avant toute autre entreprise. Les travaux de Sharma et al. [75] introduisant une mobilité adaptative en fonction de l'épaisseur d'interface pourrait être une piste prometteuse. Cela permettrait de faire des simulations polyphasiques sans connaissance *a priori* du système physique. Si l'on parvient à implémenter l'étape de projection L_2 comme suggéré dans la partie précédente, alors l'utilisation du solveur en sera grandement simplifiée.

Une fois ces questions réglées, le modèle pourrait être adapté pour prendre en compte des propriétés physiques dépendant de champ extérieurs : on pourrait par exemple coupler le modèle à l'équation de la chaleur et obtenir un système CHNS non-isotherme, tel que décrit dans par Brunk et al [76], ou simuler des écoulements polyphasiques non-Newtoniens [77].

Dans Lethe, un modèle polyphasique VOF a déjà été développé et longuement testé, on pourrait donc effectuer une comparaison approfondie d'un modèle à l'autre. Même si certains résultats présentés ont été comparés à ceux du modèle VOF, le projet n'a pas mis l'accent

sur d'autres aspects que la concordance des résultats. Cela serait, à notre connaissance, la première comparaison de ce type, dans le même cadre numérique, utilisant le même solveur de mécanique des fluides et la même méthode de simulation. On pourrait alors déterminer avec plus d'exactitudes les avantages et inconvénients de chaque méthode.

8.4 Un petit mot pour la fin

Ce projet est l'aboutissement de ma maîtrise au sein du groupe de recherche CHAOS et je suis très fier de le remettre. Je tiens à souligner quelle belle aventure humaine et académique cela a été ! Je suis heureux d'avoir pu apporter ma modeste contribution au code de Lethe et remercie toutes et tous les développeurs qui ont contribué à en faire le logiciel de qualité qu'il est aujourd'hui. Je n'ai eu de cesse de m'appuyer sur le code déjà existant pour développer le modèle de ce projet, et j'ai beaucoup appris à son contact, tout comme j'ai profité des connaissances de tous ses développeurs. Aussi je conclurai en célébrant l'*open-source* et le partage sans-frontière des connaissances !

RÉFÉRENCES

- [1] L. Morawska et G. Buonanno, “The physics of particle formation and deposition during breathing,” *Nature Reviews Physics*, vol. 3, n°. 5, p. 300–301, mai 2021, publisher : Nature Publishing Group. [En ligne]. Disponible : <https://www.nature.com/articles/s42254-021-00307-4>
- [2] “Multiphase flow,” mai 2024, page Version ID : 1226200179. [En ligne]. Disponible : https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Multiphase_flow&oldid=1226200179
- [3] I. Kataoka et A. Serizawa, “Bubble Flow,” dans *Thermopedia*. Begel House Inc., sept. 2010. [En ligne]. Disponible : <https://www.thermopedia.com/content/8/>
- [4] S. Candel, *Mécanique des fluides*, dunod éd., juin 2001.
- [5] S. Hamid, T. Kolev, Q. Thong, Q. Le Gia et W. Wu, “Numerical Solution of Partial Differential Equations Using Wavelet Approximation Space,” juill. 2000.
- [6] “Understanding and Changing the Element Order.” [En ligne]. Disponible : <https://www.comsol.com/support/learning-center/article/Understanding-and-Changing-the-Element-Order-47301>
- [7] X. He, S. Chen et R. Zhang, “A Lattice Boltzmann Scheme for Incompressible Multiphase Flow and Its Application in Simulation of Rayleigh–Taylor Instability,” *Journal of Computational Physics*, vol. 152, n°. 2, p. 642–663, juill. 1999. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999199962575>
- [8] S. Zahedi, M. Kronbichler et G. Kreiss, “Spurious currents in finite element based level set methods for two-phase flow,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 69, n°. 9, p. 1433–1456, 2012, _eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/fld.2643>. [En ligne]. Disponible : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/fld.2643>
- [9] S. Hysing, S. Turek, D. Kuzmin, N. Parolini, E. Burman, S. Ganesan et L. Tobiska, “Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 60, n°. 11, p. 1259–1288, 2009, _eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/fld.1934>. [En ligne]. Disponible : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/fld.1934>
- [10] H. Mirsandi, W. Smit, G. Kong, M. Baltussen, E. Peters et J. Kuipers, “Bubble formation from an orifice in liquid cross-flow,” *Chemical Engineering Journal*, vol. 386, p. 120902, avr. 2020. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1385894719302062>

- [11] J. Dong, K. Inthavong et J. Tu, "Multiphase Flows in Biomedical Applications," janv. 2016, p. 1–24.
- [12] L. Liu et A. Corma, "Metal Catalysts for Heterogeneous Catalysis : From Single Atoms to Nanoclusters and Nanoparticles," *Chemical Reviews*, vol. 118, avr. 2018.
- [13] N. Kantarci, F. Borak et K. O. Ulgen, "Bubble column reactors," *Process Biochemistry*, vol. 40, n°. 7, p. 2263–2283, juin 2005. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032959204004418>
- [14] C. E. Brennen, *Fundamentals of Multiphase Flow*. Cambridge : Cambridge University Press, 2005. [En ligne]. Disponible : <https://www.cambridge.org/core/books/fundamentals-of-multiphase-flow/FC7E6D7E54AC9D1C178EDF88D6A75FFF>
- [15] B. Blais, L. Barbeau, V. Bibeau, S. Gauvin, T. E. Geitani, S. Golshan, R. Kamble, G. Mirakhori et J. Chaouki, "Lethe : An open-source parallel high-order adaptative CFD solver for incompressible flows," *SoftwareX*, vol. 12, p. 100579, juill. 2020. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352711020302922>
- [16] M. Modell et R. C. Reid, *Thermodynamics and its applications*. Englewood Cliffs, N.J., Prentice-Hall, 1974. [En ligne]. Disponible : <http://archive.org/details/thermodynamicsit00mode>
- [17] J. N. Reddy, N. K. Anand et P. Roy, "Finite Element and Finite Volume Methods for Heat Transfer and Fluid Dynamics," oct. 2022, ISBN : 9781009275453 Publisher : Cambridge University Press. [En ligne]. Disponible : <https://www.cambridge.org/highereducation/books/finite-element-and-finite-volume-methods-for-heat-transfer-and-fluid-dynamics/09F89D85D22CF66BE44D330048C83805>
- [18] S. Takagi et Y. Matsumoto, "Surfactant Effects on Bubble Motion and Bubbly Flows," *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 43, n°. Volume 43, 2011, p. 615–636, janv. 2011, publisher : Annual Reviews. [En ligne]. Disponible : <https://www.annualreviews.org/content/journals/10.1146/annurev-fluid-122109-160756>
- [19] K. D. J, "Sur la forme que prennent les équations du mouvements des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais connues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité," *Archives Neerlandaises des Sciences Exactes et Naturelles*, vol. 6, p. 1–24, 1901. [En ligne]. Disponible : <https://cir.nii.ac.jp/crid/1573105975105495040>
- [20] D. Anderson, G. McFadden et A. Wheeler, "Diffuse-Interface Methods in Fluid Mechanics," *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 30, juin 1997.
- [21] J. U. Brackbill, D. B. Kothe et C. Zemach, "A continuum method for modeling surface tension," *Journal of Computational Physics*, vol. 100, n°. 2, p. 335–354,

- juin 1992. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002199919290240Y>
- [22] P. G. Drazin et W. H. Reid, *Hydrodynamic Stability*, 2^e éd., ser. Cambridge Mathematical Library. Cambridge : Cambridge University Press, 2004. [En ligne]. Disponible : <https://www.cambridge.org/core/books/hydrodynamic-stability/A0E78BC88D5572AED79CCCE8B977707C>
- [23] R. Scardovelli et S. Zaleski, “Direct Numerical Simulation of Free-Surface and Interfacial Flow,” *Annu. Rev. Fluid Mech.*, vol. 31, janv. 1999.
- [24] E. Olsson et G. Kreiss, “A conservative level set method for two phase flow,” *Journal of Computational Physics*, vol. 210, n°. 1, p. 225–246, nov. 2005. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999105002184>
- [25] W. Noh et P. Woodward, “SLIC (simple line interface method),” dans *Lect. Notes Phys.*, janv. 2007, vol. 59, p. 330–340, journal Abbreviation : Lect. Notes Phys.
- [26] D. Youngs, “Time-Dependent Multi-material Flow with Large Fluid Distortion,” dans *Num. Method Fluid Dyn.*, janv. 1982, vol. 24, p. 273–285, journal Abbreviation : Num. Method Fluid Dyn.
- [27] S. Aliabadi et T. E. Tezduyar, “Stabilized-finite-element/interface-capturing technique for parallel computation of unsteady flows with interfaces,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 190, n°. 3, p. 243–261, oct. 2000. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782500002000>
- [28] S. Osher et J. A. Sethian, “Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations,” *Journal of Computational Physics*, vol. 79, n°. 1, p. 12–49, nov. 1988. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999188900022>
- [29] S. Osher et R. Fedkiw, “The Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces,” dans *Applied Mechanics Reviews*, mai 2004, vol. 57, p. xiv+273, journal Abbreviation : Applied Mechanics Reviews.
- [30] M. Sussman, P. Smereka et S. Osher, “A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow,” *Journal of Computational Physics*, vol. 114, n°. 1, p. 146–159, sept. 1994. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999184711557>
- [31] M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka et S. Osher, “An improved level set method for incompressible two-phase flows,” *Computers & Fluids*, vol. 27, n°. 5, p. 663–680, juin 1998. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793097000534>

- [32] T. Long, J. Cai et S. Pan, “A conservative level-set method based on a posterior mass correction preserving distance property for incompressible multiphase flows simulations,” févr. 2022, arXiv :2202.10275 [physics]. [En ligne]. Disponible : <http://arxiv.org/abs/2202.10275>
- [33] J. W. Cahn et J. E. Hilliard, “Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 28, n°. 2, p. 258–267, févr. 1958. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1063/1.1744102>
- [34] D. Lee, J.-Y. Huh, D. Jeong, J. Shin, A. Yun et J. Kim, “Physical, mathematical, and numerical derivations of the Cahn–Hilliard equation,” *Computational Materials Science*, vol. 81, p. 216–225, janv. 2014. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025613004801>
- [35] M. Sohaib et A. Shah, “Numerical solution of coupled Cahn–Hilliard Navier–Stokes equations for two-phase flows having variable density and viscosity,” 2023, publisher : John Wiley and Sons Ltd.
- [36] S. Towfighi et H. Mehrabian, “Cahn–Hilliard diffuse interface simulations of bubble-wall collisions,” 2018, publisher : arXiv.
- [37] S. K. Stoter, T. B. van Sluijs, T. H. Demont, E. H. van Brummelen et C. V. Verhoosel, “Stabilized immersed isogeometric analysis for the Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations, with applications to binary-fluid flow through porous media,” *A Special Issue in Honor of the Lifetime Achievements of T. J. R. Hughes*, vol. 417, 2023, publisher : Elsevier B.V.
- [38] A. Ghorbanpour Arani, R. Haghani-Hassan-Abadi, M. Majidi et M.-H. Rahimian, “Drag Coefficient of a Rising Bubble in a Shear-Thinning Fluid Using the Power-Law Scheme Coupled with a Cahn–Hilliard Equation with a Variable Mobility : A Lattice Boltzmann Study and Comparison with Experiment,” 2022, publisher : SSRN.
- [39] F. Boyer, C. Lapuerta, S. Minjeaud, B. Piar et M. Quintard, “Cahn–Hilliard/Navier–Stokes Model for the Simulation of Three-Phase Flows,” *Transport in Porous Media*, vol. 82, n°. 3, p. 463–483, avr. 2010. [En ligne]. Disponible : <http://link.springer.com/10.1007/s11242-009-9408-z>
- [40] X. Chen, N. Chen et A. Delgado, “Numerical study of formation of a series of bubbles at a submerged orifice,” *Applied Mathematical Modelling*, vol. 73, p. 668–694, sept. 2019. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0307904X19302069>
- [41] L. Maier, S. Brosch, M. Gaehr, J. Linkhorst, M. Wessling et U. Niessen, “Convective Drying of Porous Media : Comparison of Phase-Field Simulations with Microfluidic

- Experiments,” *Transport in Porous Media*, vol. 151, n°. 3, p. 559–583, févr. 2024. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1007/s11242-023-02051-y>
- [42] S. R. D. Groot et P. Mazur, *Non-Equilibrium Thermodynamics*. Dover Publications, janv. 2013. [En ligne]. Disponible : <https://www.perlego.com/book/1444482/non-equilibrium-thermodynamics-pdf>
- [43] H. J. V. Tyrrell, “The origin and present status of Fick’s diffusion law,” *Journal of Chemical Education*, vol. 41, n°. 7, p. 397, juill. 1964, publisher : American Chemical Society. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1021/ed041p397>
- [44] P. C. Hohenberg et B. I. Halperin, “Theory of dynamic critical phenomena,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 49, n°. 3, p. 435–479, juill. 1977, publisher : American Physical Society. [En ligne]. Disponible : <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.49.435>
- [45] J. Lowengrub et L. Truskinovsky, “Quasi-incompressible Cahn–Hilliard fluids and topological transitions,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 454, n°. 1978, p. 2617–2654, oct. 1998, publisher : Royal Society. [En ligne]. Disponible : <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.1998.0273>
- [46] H. Abels, H. Garcke et G. Grün, “Thermodynamically Consistent, Frame Indifferent Diffuse Interface Models for Incompressible Two-Phase Flows with Different Densities,” avr. 2011, arXiv :1104.1336 [physics]. [En ligne]. Disponible : <http://arxiv.org/abs/1104.1336>
- [47] A. Lovrić, W. G. Dettmer et D. Perić, “Low Order Finite Element Methods for the Navier-Stokes-Cahn-Hilliard Equations,” nov. 2019, arXiv :1911.06718 [physics]. [En ligne]. Disponible : <http://arxiv.org/abs/1911.06718>
- [48] G. Puel et A. Barbarulo, *Simulation of multiphysics couplings with FEM*, 2022.
- [49] S. Mandelbrojt et L. Schwartz, “Jacques Hadamard (1865-1963),” *Bulletin of the American Mathematical Society*, vol. 71, n°. 1, p. 107–129, 1965. [En ligne]. Disponible : <https://www.ams.org/bull/1965-71-01/S0002-9904-1965-11243-5/>
- [50] B. Daniele, “Mixed Finite Element Methods and Applications | SpringerLink.” [En ligne]. Disponible : <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-36519-5>
- [51] O. A. Ladyzhenskaya, *The Boundary Value Problems of Mathematical Physics*. Springer Science & Business Media, mars 2013, google-Books-ID : CADmBwAAQBAJ.
- [52] H. Poincaré, “Sur les Equations aux Dérivées Partielles de la Physique Mathématique,” *American Journal of Mathematics*, vol. 12, n°. 3, p. 211–294, 1890, publisher : The Johns Hopkins University Press. [En ligne]. Disponible : <https://www.jstor.org/stable/2369620>

- [53] D. Kelly, “A posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method : Part I—error analysis,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, janv. 1983. [En ligne]. Disponible : https://www.academia.edu/56521862/A_posteriori_error_analysis_and_adaptive_processes_in_the_finite_element_method_Part_I_error_analysis
- [54] C. F. .- A. d. t. Gauss, *Methodus nova integralium valores per approximationem inveniendi auctore Carolo Friderico Gauss*, 1815. [En ligne]. Disponible : <https://gallica.bnf.fr/ark:/12148/bpt6k2412190>
- [55] A. Hay, S. Etienne, D. Pelletier et A. Garon, “hp-Adaptive time integration based on the BDF for viscous flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. 291, p. 151–176, juin 2015. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999115001692>
- [56] Message Passing Interface Forum, “MPI : a message-passing interface standard version 4.1,” manual, nov. 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www mpi-forum.org/docs/mpi-4.1/mpi41-report.pdf>
- [57] D. Arndt, W. Bangerth, D. Davydov, T. Heister, L. Heltai, M. Kronbichler, M. Maier, J.-P. Pelteret, B. Turcksin et D. Wells, “The deal.II finite element library : Design, features, and insights,” *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 81, p. 407–422, janv. 2021. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122120300894>
- [58] T. {T}rilinos {P}roject {T}eam, “The {T}rilinos {P}roject {W}ebsite,” manual, 2020.
- [59] C. Burstedde, T. Griesbach, L. C. Wilcox, H. Brandt, M. Hirsch, P. Kestener, J. Rudi, E. A. Hereth, J. Holke, H. Lin, T. Isaac, M. Kirilin, L. Carlin, G. Seastream, B. Turcksin, J. Krasnansky, M. Schlottke-Lakemper, A. Fikl, H. Ranocha, H. Frank, G. Ghosh, S. Aiton, T. Heister, W. Bangerth, M. Ugolotti, P. Jolivet, M. Matveev, J. Kozdon, O. Iffrig et J. A. Fonseca, “The p4est software library version 2.8.6,” mars 2024. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.5281/zenodo.10839051>
- [60] Ayachit et Utkarsh, *The ParaView Guide : A Parallel Visualization Application*, paraview 4.3 éd. Kitware, Incorporated, janv. 2015.
- [61] P. Yue, C. Zhou et J. J. Feng, “Spontaneous shrinkage of drops and mass conservation in phase-field simulations,” *Journal of Computational Physics*, vol. 223, n°. 1, p. 1–9, avr. 2007. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999106005857>
- [62] J. Liu, L. Dedè, J. A. Evans, M. J. Borden et T. J. R. Hughes, “Isogeometric analysis of the advective Cahn–Hilliard equation : Spinodal decomposition under shear

- flow,” *Journal of Computational Physics*, vol. 242, p. 321–350, juin 2013. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999113001186>
- [63] D. Jacqmin, “Calculation of Two-Phase Navier–Stokes Flows Using Phase-Field Modeling,” *Journal of Computational Physics*, vol. 155, n°. 1, p. 96–127, oct. 1999. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999199963325>
- [64] K. Binder, “Theory of first-order phase transitions,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 50, n°. 7, p. 783, juill. 1987. [En ligne]. Disponible : <https://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/50/7/001>
- [65] D. Arndt, M. Braack et G. Lube, “Finite Elements for the Navier-Stokes Problem with Outflow Condition,” *Numerical Mathematics and Advanced Applications ENUMATH*, vol. 112, p. 95–103, 2016, publisher : American Medical Association. [En ligne]. Disponible : http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-39929-4_10
- [66] T. Tezduyar et S. Sathe, “Stabilization parameters in SUPG and PSPG formulations,” *Journal of Computational and Applied Mechanics*, vol. 4, p. 71–88, janv. 2003.
- [67] D. Gennes et F. Brochard-Wyart, *Gouttes, Bulles, Perles Et Ondes*, janv. 2005.
- [68] J. C. Martin, W. J. Moyce, J. C. Martin, W. J. Moyce, W. G. Penney, A. T. Price et C. K. Thornhill, “Part IV. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane,” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 244, n°. 882, p. 312–324, janv. 1997, publisher : Royal Society. [En ligne]. Disponible : <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rsta.1952.0006>
- [69] S. Liu, S. Li et J. Liu, “Jurin’s law revisited : Exact meniscus shape and column height,” *The European Physical Journal E*, vol. 41, n°. 3, p. 46, mars 2018. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1140/epje/i2018-11648-1>
- [70] P. Saksono et D. Perić, “On finite element modelling of surface tension : Variational formulation and applications – Part II : Dynamic problems,” *Computational Mechanics*, vol. 38, p. 251–263, août 2006.
- [71] M.-K. Li, A.-M. Zhang, F.-R. Ming, P.-N. Sun et Y.-X. Peng, “An axisymmetric multiphase SPH model for the simulation of rising bubble,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 366, p. 113039, juill. 2020. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782520302231>
- [72] J. Hua et J. Lou, “Numerical simulation of bubble rising in viscous liquid,” *Journal of Computational Physics*, vol. 222, n°. 2, p. 769–795, mars 2007. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999106003949>

- [73] S. Shin et B. Choi, “Numerical simulation of a rising bubble with phase change,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 100, p. 256–266, mai 2016. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431116301582>
- [74] S. Shin, I. Yoon et D. Juric, “The Local Front Reconstruction Method for direct simulation of two- and three-dimensional multiphase flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. 230, n°. 17, p. 6605–6646, juill. 2011. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999111002981>
- [75] D. Sharma, M. Coquerelle, A. Erriguiible et S. Amiroudine, “Adaptive interface thickness based mobility—Phase-field method for incompressible fluids,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 142, p. 103687, sept. 2021. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030193222100135X>
- [76] A. Brunk et D. Schumann, “Nonisothermal Cahn-Hilliard Navier-Stokes system,” mai 2024, arXiv :2405.13936 [cs, math]. [En ligne]. Disponible : <http://arxiv.org/abs/2405.13936>
- [77] S. Frigeri, M. Grasselli et D. Pražák, “Nonlocal Cahn–Hilliard–Navier–Stokes systems with shear dependent viscosity,” *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, vol. 459, n°. 2, p. 753–777, mars 2018. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022247X17309915>