

Titre: Comparaison de deux méthodes de Boltzmann sur réseau et
Title: modélisation préliminaire de l'impact de gouttelettes

Auteur: Ayman Benkiran
Author:

Date: 2025

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Benkiran, A. (2025). Comparaison de deux méthodes de Boltzmann sur réseau et
modélisation préliminaire de l'impact de gouttelettes [Mémoire de maîtrise,
Citation: Polytechnique Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/66250/>

Document en libre accès dans PolyPublie

Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/66250/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Sébastien Leclaire
Advisors:

Programme: Génie aérospatial
Program:

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

**Comparaison de deux méthodes de Boltzmann sur réseau et modélisation
préliminaire de l'impact de gouttelettes**

AYMAN BENKIRAN

Département de génie mécanique

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

Mai 2025

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

Comparaison de deux méthodes de Boltzmann sur réseau et modélisation préliminaire de l'impact de gouttelettes

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

David VIDAL, président
Sébastien LECLAIRE, membre et directeur de recherche
Jean-Yves TRÉPANIER, membre

DÉDICACE

*À mes parents, Abdelfatah et Nadia,
et à mon frère, Anas,
pour leur soutien inconditionnel... .*

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, je tiens à exprimer ma sincère reconnaissance envers mon directeur de recherche, le professeur Sébastien Leclaire, pour son accompagnement tout au long de mon projet de recherche lors de mes études de maîtrise à Polytechnique Montréal. Ses recommandations judicieuses ont été cruciales pour surmonter les obstacles lors de la conception des modèles numériques et de l'élaboration des codes de programmation. Il m'a également offert l'opportunité de vivre ma première expérience d'enseignement en tant que chargé de laboratoire.

Je remercie également sincèrement Jean-Yves Trépanier, Sami Ammar et Nicolas Pellerin, dont les retours sur mon travail et les recommandations visées m'ont énormément aidé à progresser vers mes objectifs.

J'ai aussi eu le plaisir de travailler dans le même laboratoire de recherche avec Md Sujaat Ali. Les discussions enrichissantes, tout comme son expérience de maîtrise, m'ont été d'une aide précieuse tout au long du parcours.

Par ailleurs, je suis reconnaissant au Conseil national de recherches (NRC) pour son support financier. Le travail avec le NRC m'a permis d'élargir ma connaissance sur les applications potentielles du modèle développé.

Finalement, je désire remercier ma famille pour son soutien moral indéfectible. Je pense particulièrement à mes parents, toujours présents malgré la distance géométrique qui nous sépare, puis à mon frère, qui a été ma famille ici à Montréal.

RÉSUMÉ

La modélisation de l'impact de gouttelettes sur des surfaces solides est une première étape possible pour mieux comprendre le processus de solidification post-impact de gouttelettes, notamment pour l'eau sur les surfaces de véhicules volants. Le présent mémoire dévoile une étude comparative de deux modèles de la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM) pour la simulation des écoulements bidimensionnels à deux phases. Deux modèles de la famille du gradient de couleur (CGM) sont étudiés. Les deux modèles diffèrent par leur traitement des fonctions de distribution : tandis que le modèle **CGM I** simule le transport de la masse volumique, le modèle **CGM II** met en avant le champ de couleur comme variable d'étude avant d'en déduire la masse volumique. Pour amorcer la comparaison numériquement, des simulations de vérification concernant des cas d'écoulements de type fluide-fluide ont été réalisées. En l'absence de conditions frontières complexes, les deux modèles CGM aboutissent à des comportements similaires pour des rapports de masses volumiques et de viscosités cinématiques faibles. Un léger avantage est observé pour le modèle **CGM II** en termes d'exactitude et de minimisation des courants parasites. En élevant ces rapports de propriétés physiques, le modèle **CGM II** montre une meilleure stabilité, en particulier pour un cas test instationnaire. Par la suite, une technique géométrique modélisant la mouillabilité a été implémentée. Les vérifications numériques ont démontré une exactitude adéquate des deux modèles pour l'imposition de l'angle de contact près de la zone fluide-solide. Ayant incorporé les conditions de mouillabilité, un cas test reproduisant un impact bidimensionnel d'une gouttelette sur une surface droite est simulé. Les deux modèles CGM présentent des comportements similaires du facteur d'étalement et de la vitesse de la gouttelette. La tendance suggérée dans la revue de littérature du diamètre d'étalement est reproduite à la suite de l'impact, mettant en évidence les moments cinématique, d'étalement, de relaxation, et d'équilibre. En augmentant le rapport de viscosités cinématiques puis celui de masses volumiques, le modèle **CGM II** engendre de meilleurs résultats, surtout pour des cas élevés du nombre de Weber. Le travail réalisé montre une meilleure aptitude du modèle **CGM II** à représenter un scénario physique d'impact d'une gouttelette d'eau.

ABSTRACT

Modeling the impact of droplets on solid surfaces is a possible first step towards understanding the post-impact solidification process of droplets, particularly water on flying vehicle surfaces. This thesis compares two lattice Boltzmann method (LBM) models for simulating weakly isothermal two-phase flows in two dimensions. Two models from the Color-gradient method (CGM) family are studied. The models differ in their treatment of the distribution functions : while the **CGM I** model simulates density transport, the **CGM II** model emphasizes the color field as a study variable before deducing density. To initiate the numerical comparison, verification simulations are conducted on fluid-fluid flow cases. Without complex boundary conditions, both CGM models result in similar behavior at low density and kinematic viscosity ratios. A slight advantage is observed for the **CGM II** model in terms of accuracy and parasitic current minimization. By raising these physical property ratios, the **CGM II** model exhibits improved stability, particularly for an unsteady test case. Subsequently, a geometric technique for modeling wettability is implemented. Numerical verifications revealed adequate accuracy of both models for the imposition of the contact angle near the fluid-solid zone. After incorporating the wettability conditions, a test case reproducing a two-dimensional impact of a droplet on a straight surface is performed. Both CGM models show similar spreading factor and droplet velocity behavior. The spreading diameter trend suggested in the literature review is replicated following impact, highlighting kinematic, spreading, relaxation, and equilibrium moments. By first increasing the kinematic viscosity ratio then the density ratio, the **CGM II** model generates better results, especially for high Weber number cases. The work carried out shows a better ability of the **CGM II** model to represent a physical scenario of water droplet impact.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vi
LISTE DES TABLEAUX	x
LISTE DES FIGURES	xii
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xvii
LISTE DES ANNEXES	xix
 CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Théorie de la dynamique des gouttelettes et de l'impact	1
1.1.1 Premier contact	3
1.1.2 Dynamique de post-contact	5
1.2 Méthodes numériques pour les fluides	8
1.2.1 Solveurs conventionnels de Navier-Stokes	9
1.2.2 Solveurs à base de particules	9
1.2.3 Solveurs à échelle mésoscopique	10
1.3 Objectifs de recherche	11
1.4 Plan du mémoire	12
 CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	13
2.1 Vers les écoulements multiphasiques	13
2.2 Modèles multiphasiques	14
2.3 Progrès de la méthode de gradient de couleur	15
2.3.1 Travaux réalisés	16
2.3.2 Applications	18
2.3.3 Limitations surmontées et défis actuels	18
2.4 Travaux autour de la modélisation de la mouillabilité	19
2.5 Dynamique de l'impact avec la méthode de Boltzmann sur réseau	23
2.6 Rappel des objectifs spécifiques poursuivis	26

CHAPITRE 3 THÉORIE SUR LA MÉTHODE DE BOLTZMANN SUR RÉSEAU	27
3.1 Vers la méthode de Boltzmann sur réseau	27
3.2 Récupération des équations macroscopiques	32
 CHAPITRE 4 MODÈLES NUMÉRIQUES DE LA MÉTHODE DU GRADIENT DE COULEUR À DEUX PHASES	35
4.1 Modèle de Leclaire <i>et al.</i> : CGM I	35
4.1.1 Opérateur de collision monophasique	36
4.1.2 Étape de perturbation	38
4.1.3 Étape de recoloration	40
4.1.4 Étape de propagation	41
4.2 Modèle de Subhdar : CGM II	41
4.2.1 Étape de perturbation	45
4.2.2 Étape de ségrégation	45
4.2.3 Étape de propagation	46
4.3 Cas tests de comparaisons et vérifications	47
4.3.1 Gouttelette stationnaire : loi de Laplace	48
4.3.2 Écoulement de Poiseuille à deux couches	54
4.3.3 Instabilité de Rayleigh-Taylor	58
4.3.4 Sommaire	63
 CHAPITRE 5 CONTACT FLUIDE-SOLIDE DE GOUTTELETTE EN RÉGIME STATIONNAIRE	64
5.1 Implémentation des conditions limites de mouillabilité	64
5.2 Condition initiale	67
5.3 Procédure numérique	68
5.4 Angle de contact statique en 2D	69
5.4.1 Rapport de masses volumiques unitaire	69
5.4.2 Haut rapport de masses volumiques	73
5.4.3 Raffinement de maillage et étude de convergence	75
 CHAPITRE 6 IMPACT DE GOUTTELETTE SUR UNE SURFACE SOLIDE	81
6.1 Impact de gouttelette en 2D	81
6.2 Méthodologie d'investigation numérique	83
6.3 Comparaison code-à-code	85
6.3.1 Méthodologie de vérification code-à-code	86
6.3.2 Résultats de vérification code-à-code	86

6.4 Travail avancé avec le CGM II : nombre de Weber élevé	93
6.4.1 Méthodologie de l'étude à haut nombre de Weber	93
6.4.2 Résultats de l'étude à haut nombre de Weber	94
CHAPITRE 7 CONCLUSION	97
7.1 Synthèse des travaux	97
7.2 Limitations de la solution proposée	98
7.3 Améliorations futures	98
RÉFÉRENCES	100
ANNEXES	109

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 4.1	Différentes valeurs de pression relative, des magnitudes des vitesses du champ et du nombre de <i>Mach</i> en fonction du rapport des masses volumiques. Deux valeurs de la mobilité d'interface M sont étudiées pour le modèle CGM II , soit 0.01 et 0.26. La tension interfaciale est de 0.01	52
Tableau 4.2	Nomenclature utilisée pour les cas de simulations de l'écoulement de Poiseuille. Des rapports de masses volumiques réels sont utilisés . . .	56
Tableau 4.3	Erreurs $\ Q\ _2$ entre la quantité de mouvement numérique provenant de la simulation Q^s et théorique Q^t , adoptant le modèle de CGM I et CGM II pour l'application de Poiseuille à deux couches. L'ordre de convergence est calculé entre les deux maillages les plus fins . . .	56
Tableau 4.4	Valeurs des nombres adimensionnels d'Atwood At , de Reynolds Re , et le nombre capillaire Ca pour chaque simulation étudiée . . .	60
Tableau 5.1	Dimensions du maillage par défaut, variables et paramètres utilisés pour les simulations en unité LBM . . .	70
Tableau 5.2	Résultats de l'angle de contact avec la CGM en utilisant le modèle de mouillabilité avec un maillage grossier et un rapport de masses volumiques unitaire . . .	71
Tableau 5.3	Angles de contact finaux pour les cas de mouillage et de non mouillage, en faisant varier le rapport λ . Le nombre de pas de temps nt pour chaque cas est également indiqué pour les deux modèles CGM. Le maillage est de taille $(nx \times ny) = (300 \times 100)$. . .	74
Tableau 5.4	Résultats des simulations de raffinement avec $\eta = 0.5$, présentant les angles de contact mesurés et l'amplitude de la vitesse maximale. Le rapport de masses volumiques est de 1. Le nombre correspondant pour le maillage raffiné est fixé de manière à satisfaire la condition suivante : $nx = 2 \cdot nx^* \implies \Delta t = 4 \cdot \Delta t^*$. . .	77
Tableau 5.5	Magnitude maximale de la vitesse $ \vec{u} _{\max}$ pour tous les angles de contact simulés, concernant les maillages $nx = 400$ et $nx = 800$. . .	79
Tableau 6.1	Données préliminaires recueillies pour la simulation initiale de CGM I et CGM II . Les variables sont indépendantes de l'angle de contact. Le nombre de <i>Mach</i> local maximum à tous les pas de temps est également fourni . . .	87

Tableau 6.2	Données préliminaires recueillies pour la simulation initiale de CGM I et CGM II . Le facteur d'étalement maximal \mathcal{B}_{\max} est évalué	88
-------------	---	----

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Processus de formation de bulle centrale au moment de l'impact [1]	4
Figure 1.2	Types de surface en fonction de l'angle de contact	5
Figure 1.3	Éclaboussure rapide et en couronne à la suite de l'impact de gouttelette [1]	8
Figure 1.4	Exemples de méthodes numériques des fluides, de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique	10
Figure 2.1	Force d'équilibre des tensions interfaciales à l'interface (loi de Young) [2]. Les forces de tension sont σ_{sh} , σ_{sl} et σ_{lh} entre $s-h$, $s-l$ et $l-h$ respectivement. Les trois phases dans ce cas sont la phase à haute masse volumique h (<i>high</i>), la phase à faible masse volumique l (<i>low</i>), et la phase solide s (<i>solid</i>)	21
Figure 2.2	Profil de l'évolution temporelle du facteur d'étalement (rapport du diamètre actuel d et initial D), mettant en avant quatre moments à la suite d'impact : cinématique (<i>kinematic</i>), étalement (<i>spreading</i>), relaxation (<i>relaxation</i>), et équilibre (<i>equilibrium</i>). Le temps est souvent normalisé selon une forme adimensionnelle	25
Figure 3.1	Modèles de vitesses obtenus par la discréétisation de l'espace des phases sur réseau $DdQq$: (a) $D2Q5$, (b) $D2Q9$, (c) $D3Q7$, (d) $D3Q19$, (e) Schéma directionnel du modèle $D2Q9$. Les pas d'espace sont Δx et Δy	29
Figure 3.2	Étapes de collision et de propagation de la LBM en 2D et dans 9 directions ($D2Q9$), inspiré de [3]. La magnitude des PDFs dans une direction est arbitraire	31
Figure 4.1	Solution initiale du champs de couleur (exemple avec φ_{II}) avec une gouttelette de rayon $\frac{R_0}{L} = 0.25$ dans un domaine carré, avec $nx = ny = 100$, où nx et ny sont les nombres de nœuds choisis dans la direction x et y respectivement. Les dimensions L et H sont respectivement la longueur et la hauteur du domaine. Des conditions périodiques sont appliquées à toutes les frontières, avec une vitesse du fluide nulle. Le fluide à haute masse volumique est illustré en rouge, le fluide à faible masse volumique en bleu	49
Figure 4.2	Comparaison des résultats analytiques et numériques pour la différence de pression. Le rapport de masses volumiques est $\frac{\rho_h}{\rho_l} = 1000$. Le rapport de viscosités cinématiques $\frac{\nu_h}{\nu_l}$ est maintenu constant et égal à 1	50

Figure 4.3	Différents profils du champ de couleur à l'état stationnaire à la position $y/H = 0.5$, avec différents rapports de masses volumiques. Le champs de couleur φ_I est normalisé entre 0 et 1. La tension interfaciale σ est de 0.01	51
Figure 4.4	Profils de vitesse et du nombre de <i>Mach</i> , mettant en évidence les courants parasites pour le cas test des gouttelettes stationnaires, avec une tension superficielle σ de 0.01 et un rapport de masses volumiques de 1000. Les vitesses sont de l'ordre de 10^{-6} et 10^{-7} pour CGM I et CGM II . Pour le nombre de <i>Mach</i> = $\frac{ \vec{u} }{c_s}$, les valeurs ont une grandeur de magnitude respective de 10^{-5} et 10^{-7} . Pour les nœuds avec la présence des deux phases dans le modèle CGM I , le nombre de <i>Mach</i> est calculé par une pondération de la vitesse du son de chaque phase selon sa valeur respective du champ de couleur. L'échelle de couleur est normalisée par les valeurs maximales respectives pour visualiser le profil de l'interface et de vitesse	53
Figure 4.5	Solution initiale avec deux fluides entre deux plaques fixes. Des conditions de bord (CB) périodiques sont appliquées dans la direction y , et des conditions limites de rebond à mi-chemin dans la direction x . Le centre x_0 , déterminant la position de l'interface, est situé entre deux nœuds pour conserver la symétrie. Il est supposé que la phase la plus lourde est située à la moitié gauche du domaine dans cet exemple . . .	54
Figure 4.6	Profil de la quantité de mouvement de l'écoulement de Poiseuille à deux couches avec un nombre de Reynolds unitaire, pour différents raffinements de l'espace : $nx = 40$ et $nx = 320$	57
Figure 4.7	Solution initiale pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor en 2D. L'interface est représentée en noir ($\varphi_I = 0$). Le fluide à haute masse volumique est situé à la moitié supérieure du domaine. La force de volume \vec{F}_b des modèles CGM est représentée par la force de gravité $(\vec{g})_y$	59
Figure 4.8	Résultats numériques des modèles CGM I et CGM II , en termes du comportement de l'interface et de comparaison de sa position avec des données de littérature, pour la simulation <u>a</u> du cas test de l'instabilité de Rayleigh-Taylor	61
Figure 4.9	Évolution temporelle de l'interface sous l'instabilité de Rayleigh-Taylor à $t = 0$, $t = 1.5t_0$, $t = 2t_0$, et $t = 2.5t_0$. L'interface est illustrée en noir (Simulation <u>b</u>)	62

Figure 5.1	Représentation schématique des deux corrections possibles de la direction du gradient de couleur utilisées pour la condition limite de mouillabilité. L'angle θ_c est l'angle de rotation dans ce cas entre \vec{n}_s et \vec{n}_+ ou \vec{n}_- . Les noeuds sont de type fluides (F), fluides en contact avec le solide (F-S) et noeuds solides (S)	66
Figure 5.2	Schéma descriptif de la solution initiale de la phase à forte masse volumique avec une gouttelette demi-circulaire de rayon $R_0 = 25$ dans un domaine rectangulaire ($L \times H$). L'angle de contact dans ce cas particulier est $\theta_c = 90^\circ$, et la hauteur de la gouttelette $b = 2H_h$, où b la distance de contact entre la gouttelette et la surface solide. Des conditions périodiques sont appliquées aux frontières verticales, et des conditions de non-glissement sont optées pour les parois solides, avec une vitesse du fluide initiale nulle. La condition de mouillabilité sera considérée par imposition de l'angle de contact θ_c et la correction de l'orientation du gradient de couleur $\vec{\nabla}\varphi$	67
Figure 5.3	Modèle CGM I	70
Figure 5.4	Modèle CGM II	70
Figure 5.5	Représentation du champ de couleur final dans le domaine 2D de $(nx \times ny) = (100 \times 30)$ avec $\theta_c = 90^\circ$ en utilisant la CGM	70
Figure 5.6	Graphique de l'amplitude du profil de vitesse $ \vec{u} $ en utilisant la CGM avec un angle de contact de 90° . Le domaine spatial discréteisé est de : $(nx \times ny) = (100 \times 30)$. L'amplitude est de grandeur de 10^{-4}	71
Figure 5.7	Profils finaux des champs de couleur φ_I et φ_{II} pour un angle de contact mouillant (60°) et non mouillant (120°) avec un rapport de masses volumiques unitaire	72
Figure 5.8	Schéma descriptif des quantités de masse situées dans les régions inattendues	76
Figure 5.9	Tracés finaux du champ de couleur φ_I et φ_{II} pour la taille de maille la plus raffinée ($nx = 800$), pour deux angles de contact ($\theta = 60^\circ$ et 120°), et un raffinement d'interface $\eta = 0.5$	76
Figure 5.10	Graphique logarithmique de l'erreur Em en fonction de la taille des maillages pour CGM I et CGM II , pour les valeurs suivantes 30° , 60° , 90° , 120° , et 150° . Le rapport de masses volumiques est de 1	78

Figure 5.11	Graphique logarithmique de l'erreur Em en fonction de la taille des maillages pour CGM I et CGM II , pour les valeurs suivantes 30° , 90° , et 150° . Le rapport de masses volumiques est de 1000. Le rapport de viscosités cinématiques est de 100	80
Figure 6.1	Illustration descriptive du cas test d'impact de gouttelette en 2D. Le champ de gravité est appliqué après un certain temps. La gouttelette est supposée circulaire au moment initial, avec le diamètre initial $D = H/8$. Des conditions de bord périodiques (CB) sont appliquées le long de la direction x . Des conditions aux limites de rebond complet sont appliquées aux limites horizontales supérieures et inférieures	82
Figure 6.2	Brève description de la procédure utilisée pour définir les variables indépendantes pour un cas donné, en fonction des nombres adimensionnels de Reynolds et de Weber requis. La différence entre la vitesse V^* de l'hypothèse et la vitesse V de la simulation doit être faible. Les résultats sont ensuite étudiés qualitativement avant que des mesures quantitatives ne soient effectuées, pour des vérifications code-à-code ou des comparaisons avec la littérature	84
Figure 6.3	Tracé de la solution initiale de masse volumique équilibrée de gouttelette ρ_h/ρ_h^0 . Le champ de gravité est appliqué au pas de temps suivant	87
Figure 6.4	Évolution du facteur d'étalement \mathcal{B} en fonction des pas de temps LBM. Les deux modèles CGM sont comparés. Le temps d'impact étant similaire, les lignes verticales sont superposées	89
Figure 6.5	Évolution de la vitesse des gouttelettes $ \overline{(\vec{u})_y} _h$ en fonction du temps en unités LBM. Les résultats sont présentés pour toute la durée de la simulation. Les deux modèles CGM sont comparés	90
Figure 6.6	Tracé de la solution du champ vectoriel de vitesse $\vec{u}(x/H, y/H)$ et de la magnitude (contour) juste avant l'impact, à 157000 pas de temps. La position de l'interface est indiquée en rouge	91
Figure 6.7	Évolution du facteur d'étalement \mathcal{B} en fonction du temps LBM. Les deux modèles CGM sont comparés. Le rapport de viscosités cinématiques est de 100. Le temps d'impact est à 50259 pas de temps pour les deux modèles	91
Figure 6.8	Évolution de la vitesse des gouttelettes $ \overline{(\vec{u})_y} $ en fonction du temps pour un rapport de viscosité cinématique de 100. Les résultats sont présentés sur une partie de la simulation, soit $3 \times 10^5 \Delta t$. Les deux modèles CGM sont comparés	93

Figure 6.9	Évolution du facteur d'étalement \mathcal{B} en fonction du temps adimensionnel \tilde{t} . L'axe des x est tracé en échelle logarithmique. Le résultat de CGM II est mis en évidence en comparaison avec les données de la littérature de [4]. Une surface neutre est simulée ($\theta_c = 90^\circ$). Le nombre d'Ohnesorge est $Oh = 0.197$. Les valeurs de \mathcal{B} sont extraites en utilisant l'outil logiciel fourni dans [5]	95
Figure 6.10	Évolution du facteur d'étalement \mathcal{B} en fonction du temps adimensionnel \tilde{t} pour cinq angles de contact différents. Le nombre d'Ohnesorge est $Oh = 0.197$. Le nombre de Weber est $We = 98.1$	96
Figure A.1	Illustration des conditions frontières périodiques avant et après l'étape de propagation, le long de la direction x . La frontière physique est à mi-chemin entre les noeuds	110
Figure A.2	Illustration des conditions limites de rebond complet (<i>Fullway bounce-back</i>) avec deux étapes de propagation, le long de la direction y . La collision ne s'applique que sur les noeuds fluides. Durant la collision, les PDFs sont inversées dans les noeuds solides	111
Figure A.3	Illustration des conditions limites de rebond à mi-chemin (<i>Halfway bounce-back</i>) à la suite de propagation sur une frontière perpendiculaire à l'axe x	111
Figure B.1	Modèle CGM I	112
Figure B.2	Modèle CGM II	113
Figure D.1	Graphiques du champ de gradient de couleur utilisant la CGM avec un angle de contact de 90° . Le domaine spatial discréteisé est : $(nx \times ny) = (100 \times 30)$. Les lignes solides sont cachées pour fins de visualisation des vecteurs	115
Figure E.1	Erreur relative en % de la masse volumique au cours du temps en unités LBM, pour les deux modèles CGM. La quantité m , calculée comme dans l'équation 6.1, indique la masse de la gouttelette à un pas de temps LBM donné, normalisée par sa valeur de masse volumique initiale $\rho_h^0 = 3.6$. Le CGM II sans limiteurs est également représenté. Il est à noter que l'erreur est inférieure à $6 \times 10^{-3} \%$ pour CGM II avec limiteurs, ce qui indique une faible perte de conservativité	116

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Les variables algorithmiques sont déterminées en unités LBM, définies dans la section 3.1.

θ_c	Angle de contact
BGK	Bhatnagar-Gross-Krook
φ	Champ de couleur de la CGM
CFD	<i>Computational fluid dynamics</i>
CB	Conditions de bord
CGM	<i>Color-gradient method</i>
$DdQq$	Discrétisation de l'espace des phases en q directions, en d dimensions
b	Distance de contact de la gouttelette (lu)
T	Épaisseur de l'interface (lu)
Em	Erreur de masse
\mathcal{B}	Facteur d'étalement
ω	Facteur de relaxation (-)
f_i	Fonction de distribution de probabilité selon la direction i
f_i^k	Fonction de distribution de probabilité de la phase k (mu/lu ³)
$f_i^{(e)}$	Fonction de distribution de probabilité d'équilibre
\vec{g}	Accélération gravitationnelle (lu/ts ²)
F'	Force totale du modèle CGM II (mu/lu ² /ts ²)
\vec{C}	Gradient de couleur du modèle CGM (1/lu)
H	Hauteur du domaine (lu)
H_h	Hauteur de la gouttelette (lu)
LBM	<i>Lattice Boltzmann method</i>
LGA	<i>Lattice Gas Automata</i>
L	Longueur du domaine (lu)
ρ	Masse volumique (mu/lu ³)
M	Mobilité de l'interface du modèle CGM II
MRT	<i>Multi-Relaxation time</i>
N-S	Navier-Stokes
At	Nombre adimensionnel d'Atwood
Bo	Nombre adimensionnel de Bond
Ca	Nombre adimensionnel capillaire
Oh	Nombre adimensionnel d'Ohnesorge

Re	Nombre adimensionnel de Reynolds
We	Nombre adimensionnel de Weber
nx	Nombre de nœuds dans la direction x
ny	Nombre de nœuds dans la direction y
nt	Nombre total de pas de temps numériques
Ω	Opérateur de collision monophasique du modèle CGM
\vec{n}_F	Orientation finale du vecteur normal à l'interface
K	Paramètre d'éclaboussure
β	Paramètre de reconstruction d'interface (1/lu)
α	Paramètre libre du modèle CGM
Δx	Pas d'espace (lu)
Δt	Pas de temps (ts)
W_i	Poids du modèle CGM de collision monophasique
B_i	Poids de perturbation du modèle CGM I
p	Pression
p_{hy}	Pression hydrodynamique (mu/lu/ts ²)
PDF	<i>Probability Distribution function</i> (mu/lu ³) - CGM I ; (-) - CGM II
η	Puissance de raffinement de l'interface
λ	Rapport de masses volumiques
RPAS	<i>Remotely Piloted Aircraft System</i>
RK	Rothman-Keller
t_{smooth}	Temps de lissage (ts)
τ	Temps de relaxation (-)
t^*	Temps post-collision, après perturbation si appliquée
t^{**}	Temps post-recoloration
σ	Tension interfaciale (mu/ts ²)
Φ	Terme de correction du modèle CGM I (mu/lu ³)
F_i	Terme de forçage du modèle (mu/lu ³ /ts) - CGM I ; (1/ts) - CGM II
TRT	<i>Two-Relaxation Time</i>
\vec{n}	Vecteur normal à l'interface
ν	Viscosité cinématique (lu ² /ts)
μ	Viscosité dynamique (mu/lu/ts)
\vec{c}_i	Vitesse de la population totale (lu/ts)
\vec{u}	Vitesse du fluide (lu/ts)
c_s	Vitesse du son du réseau (lu/ts)
V	Vitesse normale d'impact (lu/ts)

LISTE DES ANNEXES

Annexe A	Conditions aux limites générales	109
Annexe B	Diagrammes descriptifs des modèles CGM I et CGM II	112
Annexe C	Approximation du calcul du gradient du champ du couleur et de son Laplacien dans le modèle CGM en présence de de mouillabilité	114
Annexe D	Vérification de l'orientation du gradient du champ de couleur pour le cas d'angle statique 2D	115
Annexe E	Vérification de conservation de la masse	116

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Les aéronefs embarqués comprennent des Systèmes d'aéronefs télépilotés ou *Remotely Piloted Aircraft Systems* en anglais (RPAS), dont les missions fréquentes sont par exemple la surveillance [6]. L'un des défis rencontrés lors de leur conception est de prendre en compte les conditions de givrage présentes à haute ou basse altitude. Il faut donc trouver des solutions innovantes pour garantir la sécurité de ce type d'opérations.

Un ensemble de travaux de recherche est susceptible de produire des résultats bénéfiques à long terme pour accomplir cela. Un premier exemple est l'établissement d'une meilleure compréhension de l'impact des gouttelettes d'eau et de leur solidification sur les surfaces revêtues. De plus, il serait possible d'établir les répercussions de cet impact et de cette solidification sur les surfaces portantes statiques et les pales, ainsi que de bonifier la topologie géométrique des surfaces. Par ailleurs, la réduction du phénomène de givrage pourrait être envisagée grâce au contrôle des surfaces de contact par hydrophobicité. Un autre avantage potentiel réside dans la capacité à simuler avec précision le phénomène d'impact et le processus de congélation des gouttelettes d'eau sur les surfaces des RPAS, en particulier sur les surfaces dotées de revêtements à faible adhérence à la glace.

Ce premier projet poursuivi mènera à bâtir une base robuste pour une simulation numérique préliminaire du phénomène d'impact. Il sera question de modéliser numériquement l'hydrodynamique de gouttelettes et de leur interaction avec les frontières solides, première étape conduisant à la prédiction de la formation de la glace sur les surfaces des RPAS dans le cadre d'un projet futur.

Dans ce qui suit, la théorie de la dynamique de l'impact des gouttelettes est explorée à travers la présentation des différents mécanismes en jeu ainsi que des paramètres clés. Par la suite, quelques exemples de méthodes numériques utilisées pour l'étude de la dynamique des fluides sont exposés. Enfin, les objectifs de recherche sont discutés, suivis d'un sommaire du plan des chapitres à venir.

1.1 Théorie de la dynamique des gouttelettes et de l'impact

Comme il s'agira de modéliser la dynamique des gouttelettes et de leur impact, une compréhension de base de la dynamique entourant le processus d'impact d'une gouttelette sur une paroi est essentielle. De ce fait, la théorie correspondante est présentée.

Ce processus peut être étudié en trois événements : pré-contact, premier contact et post-

contact (également appelé période de dynamique post-impact). La dynamique d'impact peut être analysée d'un point de vue thermodynamique, en particulier en considérant que tout système physique tend à minimiser son énergie de surface. Cependant, la présente étude se concentrera plutôt sur le point de vue de la dynamique des fluides. Pendant la période de pré-contact, plusieurs forces entrent en jeu et dictent la trajectoire de la gouttelette, notamment la traînée aérodynamique, la pression et la tension interfaciale. Cette dernière maintient la cohésion de la gouttelette et façonne sa forme en vol, d'où l'importance de connaître le champ aérodynamique. En outre, la plupart des problèmes d'aérodynamique externe impliquent des écoulements monophasés. Un défi supplémentaire apparaît lors du contact d'une gouttelette avec une phase solide, menant à considérer plutôt des écoulements à diverses phases, dont la définition sera précisée plus loin (section 2.1). Dans cette optique, la théorie présentée couvre essentiellement la dynamique de l'impact et de l'événement post-contact.

Avant de passer à la subdivision du processus de premier contact et de post-contact, il est important de mentionner quelques nombres adimensionnels clés qui sont liés à l'étude de la dynamique de l'impact des gouttelettes : les nombres de Reynolds, Weber, Ohnesorge, le nombre capillaire, et le nombre de Bond. Les deux premiers caractérisent les propriétés du liquide, équilibrant respectivement les forces d'inertie et de viscosité, et les forces capillaires. Le nombre d'Ohnesorge représente l'équilibre entre les forces visqueuses, les forces d'inertie et les forces de tension interfaciale. Le nombre capillaire démontre l'effet relatif des forces visqueuses d'un liquide par rapport aux forces de tension interfaciale. Enfin, le nombre de Bond est déduit du rapport entre la force de gravité appliquée à une gouttelette et la tension interfaciale. Mathématiquement, ces nombres sans dimension sont calculés comme suit [1] :

$$Re = \frac{\rho_l DV}{\mu_l}; We = \frac{\rho_l DV^2}{\sigma} \quad (1.1)$$

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l D \sigma}} = \frac{\sqrt{We}}{Re}; Ca = \frac{\mu_l V}{\sigma} \quad (1.2)$$

$$Bo = \frac{\Delta \rho g D^2}{\sigma} \quad (1.3)$$

Comme le montrent les définitions 1.1, 1.2 et 1.3, certains nombres peuvent être déduits d'autres puisque les mêmes variables sont impliquées dans l'ensemble, c'est-à-dire le diamètre des gouttelettes D , les masses volumiques ρ_l et ρ_g du liquide et du gaz respectivement, leur viscosité dynamique μ , la tension superficielle σ , la vitesse normale d'impact V , etc. La tension superficielle σ correspond à l'énergie nécessaire pour former l'interface entre deux phases ou composants fluides, mesurée en N/m . Si la gravité est négligée dans un cas donné,

le nombre de Bond n'est pas significatif. Dans le cas contraire, la valeur de la force appliquée au liquide en raison de la gravité est prise en compte, notée g . La quantité $\Delta\rho$ est la différence de masse volumique entre deux entités. Le diamètre caractéristique D se réfère souvent au diamètre initial de la gouttelette étudiée. Les sous-sections suivantes présentent la théorie qui sous-tend la dynamique du premier contact et du post-contact, en indiquant les facteurs impliqués.

1.1.1 Premier contact

Les éléments théoriques discutés à partir de ce point s'appuieront principalement sur l'article de Josserand et Thoroddsen [1], qui fournit un résumé détaillé de l'impact des gouttelettes sur les surfaces solides. Il fournit également des applications industrielles illustrant cette théorie, notamment dans les domaines de l'impression à jet d'encre et du refroidissement. De plus, il comprend des données visuelles pertinentes ainsi qu'une revue organisée des travaux antérieurs. L'existence de ces dynamiques d'impact dans la nature est également soulignée, par exemple le cas des chutes de neige, ou des gouttes de liquide qui gèlent. Ce qui implique la nécessité d'utiliser des dispositifs anti-givrage, ou des surfaces avec des revêtements à faible adhérence. Lors d'un premier contact, de nombreux phénomènes peuvent se produire. L'accent est mis ici sur la formation de bulles centrales et le "patinage" des gouttelettes sur l'air.

Bulle centrale

Lorsqu'une gouttelette s'approche d'une surface solide, elle se déplace à travers un support (par exemple, un support gazeux). Dans certaines conditions atmosphériques, et en supposant que sa trajectoire avant impact est perpendiculaire, une bulle d'air sera généralement piégée sous son centre. Le disque d'air formé instantanément lors de l'impact se contracte rapidement en une bulle centrale, en respectant le principe de minimisation de la surface énergétique [1]. La Figure 1.1 illustre le processus de formation d'une bulle centrale.

En effet, la déformation de la base de la gouttelette et le piégeage de la bulle d'air sont régis par un équilibre entre l'inertie de la gouttelette et la pression de lubrification de l'air cherchant à s'échapper. Avec des mouvements de déformation rapides au cours de la formation de la couche d'air, comme le montre la Figure 1.1, la tension superficielle, la viscosité et la gravité peuvent être négligées devant les forces d'inertie. Cela est valable surtout lorsque la distance de séparation entre une gouttelette et un solide soit suffisamment petite pour que la pression de lubrification dans la fine couche d'air devienne significative, entraînant une décelération rapide de l'extrémité inférieure de la gouttelette. C'est ce que supposent certains

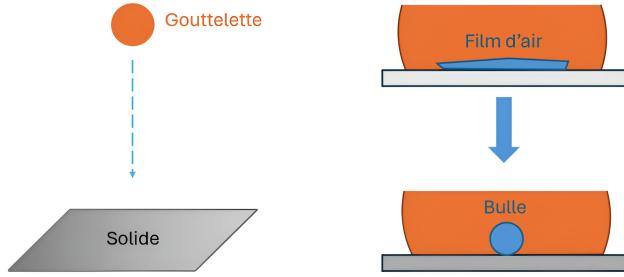


FIGURE 1.1 Processus de formation de bulle centrale au moment de l'impact [1]

travaux, comme celui de Smith *et al.* [7] et Korobkin *et al.* [8], qui ont pu modéliser l'amortissement de la couche d'air pour les cas en deux dimensions. Hicks et Purbis [9] ont adopté plus tard une configuration axisymétrique. En absence d'une ligne de contact, l'énergie de surface n'est pas suffisamment minimisée et il est possible d'observer plutôt un deuxième mécanisme.

“Patinage” sur l'air

D'autres auteurs ont suggéré que la gouttelette glisse sur une couche d'air continue sans nécessairement avoir un contact moléculaire, comme Mandre *et al.* [10]. Une technique connue sous le nom de réflexion interne totale, ou *Total Internal Reflection* en anglais, a été utilisée pour observer la lumière provenant d'une surface de glace, dans le cas de petits angles entre la lumière incidente et la surface en question. C'est ce que montre le travail de Kolinski *et al.* [11]. En effet, pour des vitesses d'impact faibles, les gouttelettes ont tendance à glisser sur une couche d'air sans contact avec le solide. Pour avoir une idée quantifiable, Ruiter *et al.* [12] ont montré que cela est possible pour des cas où la vitesse d'impact $V < 0.48 \text{ m/s}$, avec un nombre de Weber $We < 4$ pour les liquides, et une épaisseur submicromique observée de 200 nm . Il faut noter que dans d'autres cas, l'épaisseur peut être de l'ordre du subnanométrique. Leur travail fournit un exemple d'une déformation macroscopique d'une gouttelette d'eau ayant un rayon initial de 1.02 mm . La vitesse d'impact pour cet exemple a une valeur de 0.22 m/s ($We = 0.7$).

Comme déduit de ce qui précède, le type de surface est aussi un facteur à considérer. Dans le dernier exemple, la surface est hydrophile. Une surface est considérée comme hydrophile lorsque l'angle de contact est suffisamment petit, soit inférieur à 90 degrés. Ici, la vitesse d'impact est faible et le nombre de Weber montre que la tension interfaciale est dominante. Un diagramme schématique illustrant la catégorisation des types de surfaces en fonction des angles de contact est fourni à la Figure 1.2.

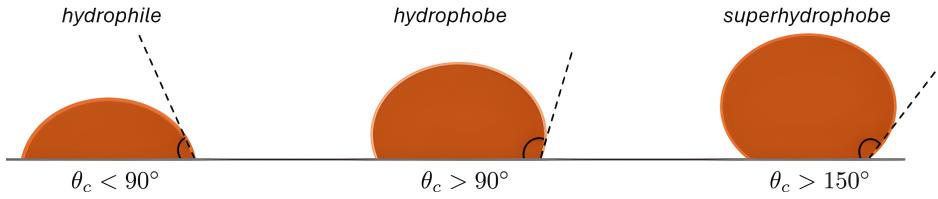


FIGURE 1.2 Types de surface en fonction de l’angle de contact

L’angle de contact représente l’angle entre la surface de contact d’un liquide et sa tangente latérale, comme le montre la Figure 1.2. Le fluide est dit mouillant si l’angle de contact θ_c respecte la condition : $\theta_c < 90^\circ$. La surface solide a la propriété d’attirer les molécules d’eau, en raison de son énergie de surface élevée. Le comportement répulsif opposé sera observé pour $\theta_c > 90^\circ$. Il s’agit de la principale métrique utilisée pour mesurer la mouillabilité d’un solide par un liquide.

1.1.2 Dynamique de post-contact

En fonction des paramètres d’impact et du substrat (par exemple, une surface solide), la dynamique post-contact se matérialisera par un étalement lisse, des éclaboussures ou un rebond, etc. Dans un travail récent, Deng *et al.* [13] ont considéré trois types, en utilisant des termes différents : fragmentation, dépôt et rebond. Ils se sont concentrés sur la présentation des effets de plusieurs facteurs. Certaines de leurs conclusions pertinentes seront également révélées. La nomenclature utilisée est la suivante : étalement (*spreading*), rebond (*rebouncing*) et éclaboussure (*splashing*).

Étalement

Dans le cas de l’étalement, le rayon de la gouttelette varie à l’impact, jusqu’à atteindre un rayon maximal. Par la suite, le liquide peut soit se rétracter, soit conserver un rayon final très proche du rayon maximal caractéristique. Cela dépend des propriétés de la surface. Il est important de mentionner ici que la quantité cruciale dans de nombreuses applications, comme l’impression à jet d’encre, n’est pas le rayon maximal, mais plutôt le rayon d’étalement résiduel. Plusieurs travaux ont tenté de trouver des corrélations entre ce rayon et les paramètres d’impact, en se basant sur l’étude de l’équilibre entre l’inertie, la viscosité et la contribution capillaire, avant de comparer les résultats avec les prédictions expérimentales. Il est possible de citer à titre d’exemple les travaux de Vadillo *et al.* [14]. Il faut également ajouter que, dans l’ensemble, ces travaux définissent deux régimes pour le facteur d’étalement B ;

un régime visqueux et un régime inertiel :

$$\mathcal{B} = \frac{R_{max}}{R_0} \quad (1.4)$$

Il s'agit du rapport entre le rayon maximal R_{max} , atteint à l'instant où l'extension de la gouttelette est maximale, et le rayon de la gouttelette R_0 à l'instant initial. Le régime visqueux est déterminé par cette extension maximale R_{max} de la gouttelette, équilibrant l'énergie cinétique et la dissipation visqueuse, avec la relation $(\mathcal{B} - 1) \propto Re^{1/5}$, entre le facteur d'étalement et le nombre de Reynolds. Un équilibre plus complexe est présent pour déterminer le régime inertiel, en ajoutant les forces capillaires avec des corrections dues à la dissipation et aux effets de mouillabilité, ce qui conduit entre autres à considérer la formulation suivante $(\mathcal{B} - 1) \propto We^{1/4}$, une relation robuste pour les substrats hydrophobes, ou $(\mathcal{B} - 1) \propto We^{1/2}$, considéré comme un paramètre d'impact encore plus robuste [1]. La mouillabilité désigne la prédisposition d'un liquide à adhérer à une surface. Les relations proposées sont généralement précises dans les régions asymptotiques. Dans le cas d'un impact sur une surface froide, Xu *et al.* [15] ont fourni dans leur article quelques caractéristiques importantes des gouttelettes, telles que l'effet de la vitesse d'impact sur le diamètre maximal après étalement. Plus la vitesse d'impact est élevée, plus le diamètre maximal des gouttelettes augmente. La température de la surface n'a pas d'effet significatif sur le taux d'étalement maximal, ce qui indique la domination de la force d'inertie dans la période d'étalement. En d'autres termes, c'est l'énergie d'impact qui a le plus d'influence.

En outre, il convient de mentionner, comme l'ont souligné Deng *et al.* [13], qu'un autre facteur dans le mécanisme d'étalement est la tension interfaciale. Plus cette variable est élevée, plus le temps d'étalement est court. Quant à l'angle de contact et au rapport de masses volumiques (c'est-à-dire le rapport entre les masses volumiques du liquide et du gaz), ils ont un effet direct sur la formation de la couche d'air : plus ils sont élevés, plus la probabilité que la gouttelette passe à travers l'étalement ou rebondisse sur la couche d'air est grande. Un rapport de masses volumiques plus élevé facilite le processus d'étalement. Par conséquent, le diamètre résiduel et le temps de contact sont plus élevés que dans le cas d'un rapport de masses volumiques plus faible. De plus, ce rapport élevé peut entraîner un étalement de la gouttelette sur une couche d'air. Ce facteur a d'autres effets tels que l'augmentation de l'épaisseur du film d'air. Au contraire, un nombre de Reynolds élevé peut entraîner la disparition de la couche d'air, dont l'épaisseur devient de plus en plus faible.

Perez [16] a indiqué que sur les surfaces superhydrophobes, l'étalement est peu probable ou minime, ce qui indique une faible mouillabilité. En revanche, la dynamique d'étalement est

plus importante sur les surfaces hydrophiles.

Rebond

Dans d'autres cas, il y a un rebond, en particulier lors de l'impact sur des surfaces superhydrophobes. Il peut en résulter un rebond partiel ou complet, voire la formation d'un jet singulier. Ce mécanisme a été observé sur l'un des résultats présentés par Bartolo *et al.* [17], pour un impact sur une surface superhydrophobe à des vitesses ne dépassant pas 0.68 m/s . Ce phénomène est en grande partie due à la convergence des ondes capillaires à l'apex, le point le plus élevé de la surface inférieure de la gouttelette. Cela peut également entraîner le piégeage d'une bulle d'air à l'intérieur de la gouttelette.

Par ailleurs, Deng *et al.* [13] ont constaté que, dans certaines conditions, l'effet de la masse volumique de l'air devient significatif, par exemple en provoquant une hauteur de rebond considérable, mais que la tendance devient non linéaire après une certaine limite du rapport de masses volumiques. En outre, la tendance d'une gouttelette à rebondir est amplifiée par l'augmentation de l'angle de contact et/ou du nombre de Bond, ou par la diminution de la taille de la gouttelette. Ils montrent également que le processus de rebond est affecté par le rapport de masses volumiques : La hauteur minimale du barycentre de la gouttelette est d'autant plus élevée que ce rapport est faible. À des rapports de masses volumiques plus élevés (i.e. 1600), la hauteur de rebond diminue rapidement, en raison de la diminution des interactions entre la gouttelette et la surface. Par conséquent, la première hauteur maximale dans un régime de rebond diminue dans ce cas. Leur analyse a été réalisée avec $\theta_C = 150^\circ$.

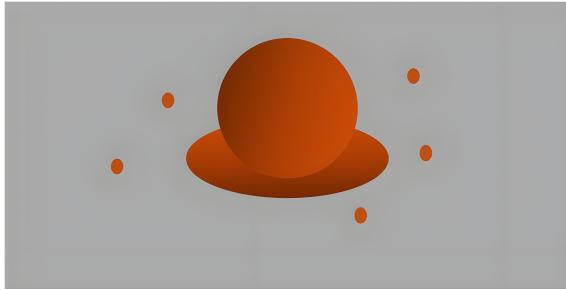
Éclaboussure

Enfin, une dynamique importante peut se produire : lorsque la gouttelette a une vitesse d'impact élevée, elle se brise au contact et éjecte des parties plus petites. Mathématiquement, la condition pour cela est que le paramètre d'éclaboussure K dépasse approximativement 3000, étant une règle empirique. Ce paramètre est défini ainsi :

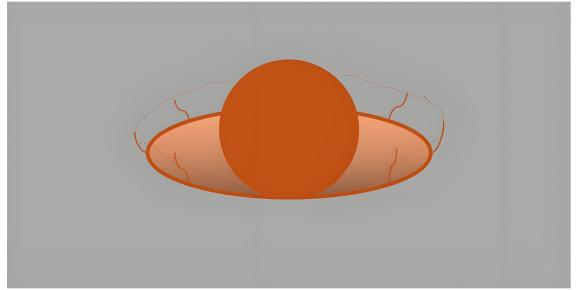
$$K = We\sqrt{Re} \quad (1.5)$$

Le paramètre K de l'équation 1.5 implique l'inertie, la force de contrainte visqueuse et la tension interfaciale, représentées par les nombres de Reynolds et de Weber. La nature de l'éclaboussure est divisée en deux catégories dans la littérature : l'éclaboussure rapide (*prompt*

splash) et l'éclaboussure en couronne (*corona splash*), comme le montre la Figure 1.3.



(a) Éclaboussure rapide.



(b) Éclaboussure en couronne.

FIGURE 1.3 Éclaboussure rapide et en couronne à la suite de l'impact de gouttelette [1]

Lorsque des gouttelettes sont libérées rapidement depuis l'extrémité de la lamelle, il s'agit de l'éclaboussure rapide (Figure 1.3a). Au contraire, une structure en forme de bol se forme à mesure que la lamelle intacte s'éloigne, avant de se diviser en gouttelettes plus fines : c'est l'éclaboussure en couronne (Figure 1.3b). Xu *et al.* [18] ont proposé que les éclaboussures rapides sont causées par la rugosité de la surface, tandis que les éclaboussures de couronne sont dues à la traînée à l'avant de la lamelle. Dans ce dernier cas, le gaz environnant provoque d'intenses instabilités par sa pression. Cela n'exclut pas l'existence d'éclaboussures rapides à l'échelle microscopique.

1.2 Méthodes numériques pour les fluides

Le contexte du projet étant posé, où il s'agit de simuler le mouvement des fluides et de prendre en compte la théorie de la dynamique de l'impact des gouttelettes, il est apparu essentiel d'explorer les outils disponibles pour aborder ce type de problème. Depuis de nombreuses années, l'approche expérimentale a été adoptée et a montré ses avantages. Elle a permis d'obtenir des informations précieuses sur différents phénomènes et s'est révélée indispensable pour la mise en place de nombreuses mesures pertinentes. Cependant, elle peut présenter certaines limites dans des scénarios plus complexes, tels que la capture précise d'une dynamique interne détaillée (comme le calcul des gradients de vitesse) ou la mesure directe des distributions de température. Dans de tels cas, les simulations numériques constituent une alternative pertinente. De plus, la combinaison de ces deux approches, expérimentale et numérique, donne l'occasion de comparer les résultats, ce qui permet de mener le processus de validation. La deuxième partie de cette section présente donc quelques-unes des méthodes utilisées pour résoudre les problèmes impliquant des fluides. Il est proposé de la diviser en trois parties : les

approches conventionnelles de résolution des équations de Navier-Stokes (N-S), les solveurs à base de particules (*Particle-based solvers*), puis les méthodes à une échelle intermédiaire, principalement la méthode de Boltzmann sur réseau (*Lattice Boltzmann method*).

1.2.1 Solveurs conventionnels de Navier-Stokes

Les méthodes conventionnelles de résolution des problèmes de mécanique des fluides permettent d'obtenir une approximation des valeurs des variables à l'échelle macroscopique (pression, vitesse, masse volumique, etc.) en différents points de discréétisation d'un domaine pré-déterminé. Comme les équations de N-S sont des équations aux dérivées partielles, les valeurs aux nœuds sont généralement exploitées pour évaluer les dérivées partielles souhaitées, explicitement trouvées dans ces équations. Ces méthodes traitent le fluide comme un milieu continu. Parmi elles, la méthode des différences finies (FD), qui définit le champ d'intérêt par une grille de nœuds, généralement carrée, et la méthode des volumes finis (FV), où la valeur approximative en chaque point du domaine discréétisé résulte de la moyenne des valeurs des variables recherchées dans le volume défini autour de nœuds, en résolvant la forme intégrée des équations de N-S [19], et la méthode des éléments finis (FE), qui implique l'interpolation des valeurs des nœuds voisins [20]. Dans la littérature, ces méthodes font partie des méthodes conventionnelles de la dynamique des fluides numérique ou *Computational fluid dynamics* (CFD). L'une des principales limites de ces solveurs est le processus de génération du maillage, qui reste très complexe et peut se complexifier grandement pour les écoulements multiphasiques, puis aboutir à des temps de calcul considérables si une exactitude élevée est recherchée.

1.2.2 Solveurs à base de particules

Dans le cas des solveurs basés sur les particules, leur fonctionnement n'est pas basé sur la résolution directe de ces équations de N-S, mais plutôt sur le traitement du fluide comme une somme de plusieurs particules. Le comportement des particules à l'échelle microscopique est généralement régi par l'équation de Hamilton [21]. Cette dernière est particulièrement applicable lorsque le mouvement des particules est influencé à la fois par l'énergie cinétique et l'énergie potentielle. La dynamique moléculaire (MD), qui suit la position des particules, est pertinente pour les cas impliquant des phénomènes microscopiques, tels que l'étude des réactions chimiques, mais elle est limitée par son incapacité à résoudre des problèmes à plus grande échelle. Un exemple de son application dans le contexte de l'électrocoalescence de gouttelettes, un phénomène résultant de la polarisation des gouttelettes sous l'action d'un champ électrique, est donné par Lingbo *et al.* [22] dans leur article de synthèse.

1.2.3 Solveurs à échelle mésoscopique

Il existe également des modèles de gaz sur réseau, dont la méthode d'automates sur réseau (LGA), qui considèrent des particules fictives situées dans un réseau de cellules se propageant avant d'entrer en collision, à l'instar des principes des gaz réels. Suite au développement de diverses sous-méthodes de ces modèles, la méthode de Boltzmann sur réseau ou *Lattice Boltzmann method* (LBM) est née, fonctionnant essentiellement de la même manière à l'échelle mésoscopique [20]. Un résumé de ces méthodes est présenté dans la Figure 1.4.

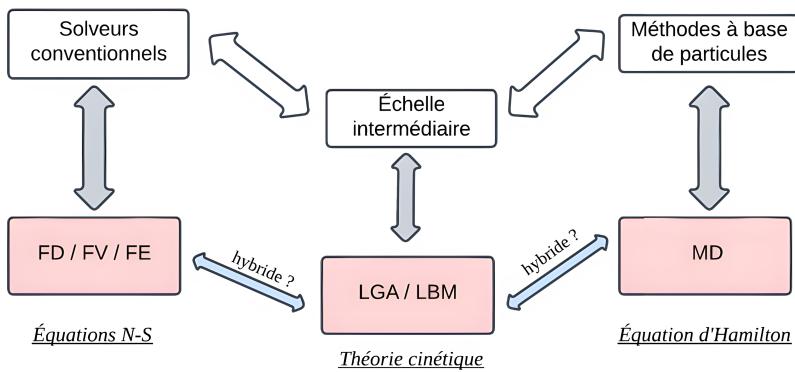


FIGURE 1.4 Exemples de méthodes numériques des fluides, de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique

La LBM simule le comportement macroscopique d'un fluide en représentant la dynamique moyenne de collections de molécules. Elle reproduit également, dans une certaine mesure, les phénomènes microscopiques. Les aspects clés d'un point de vue microscopique sont maintenus, comme le respect des règles de collisions des particules ainsi que la théorie cinétique. Dans certains cas, la LBM peut être couplée à d'autres méthodes, y compris celles conçues pour différentes échelles, afin d'obtenir un modèle hybride.

Enfin, la LBM n'est pas limitée à tous les détails des interactions moléculaires, si ce n'est, par exemple, les lois de conservation les plus importantes (c'est-à-dire la masse, la quantité de mouvement et l'énergie). Elle a le pouvoir de traiter la physique complexe à l'échelle mésoscopique, qui n'est pas atteinte par la mécanique des milieux continus, avec la simplicité de l'algorithme et des caractéristiques de calcul attrayantes. Plusieurs applications sont possibles : problèmes acoustiques, aérodynamique, combustion, et transfert de chaleur, etc. En plus, elle traite très bien la capture ou le suivi des interfaces qui se manifestent lorsque plusieurs entités sont présentes (par exemple, une gouttelette d'eau et une surface solide). Ceci est parfois accompli en ajoutant des forces mésoscopiques d'une manière simple en tant

que terme source [23]. Cela explique pourquoi il existe une abondante littérature de recherche dans ce domaine. Par conséquent, la LBM semble être un candidat solide en tant qu'outil utile et prometteur pour le projet envisagé. Cette méthode a été utilisée fréquemment pour la simulation des écoulements multiphasiques, soit des écoulements avec des fluides à différentes propriétés physiques. C'est pourquoi des modèles multiphasiques ont été dérivés, dont la méthode de gradient de couleur, ou *Color-Gradient method* (CGM). Celle-ci est reconnue pour sa stabilité et sa robustesse même avec des rapports de viscosités cinématiques modérément non unitaires. La CGM classique ayant des limitations à des rapports de masses volumiques élevés, des versions améliorées du modèle ont été élaborées afin d'améliorer la stabilité dans ces cas, discuté plus en détail dans la revue de littérature.

1.3 Objectifs de recherche

Ayant pris connaissance du contexte général et des outils numériques potentiels à disposition pour résoudre la problématique traitée, il est suggéré de détailler le travail à poursuivre à travers la définition des objectifs spécifiques. Il est à rappeler que ce travail vise une modélisation préliminaire de l'impact d'une gouttelette. Ainsi l'objectif principal est le suivant : **Comparer les capacités de deux méthodes de Boltzmann sur réseau pour la simulation des écoulements à deux phases, pour des cas à haut rapport de masses volumiques et procéder à une modélisation préliminaire de l'impact de gouttelettes sur des surfaces droites, sèches et solides.**

Sachant que deux modèles CGM de la LBM multiphasique sont partiellement disponibles dans le laboratoire de recherche, les objectifs spécifiques sont définis comme suit :

- Réviser la théorie et les étapes de résolution des deux modèles CGM étudiées dans le cadre de la simulation des écoulements à deux phases.
- Vérifier la capacité des deux CGM à résoudre des simulations de cette catégorie d'écoulements et à capturer l'interaction physique entre deux fluides.
- Développer un modèle de mouillabilité compatible avec les deux modèles CGM, assurant une prise en compte du contact fluide-solide, puis comparer ces modèles afin d'identifier le plus favorable en termes de stabilité, performance et précision.
- Implémenter les mécanismes de l'impact de gouttelettes sur une surface droite, sèche et solide pour les deux modèles CGM, en tenant en compte des conditions de mouillabilité et de différents facteurs en jeu, comme le nombre adimensionnel de Weber, de Reynolds, et de Bond.

Par ailleurs, cherchant à atteindre ces objectifs spécifiques, des hypothèses sont adoptées. Les simulations sont réalisées dans un domaine bidimensionnel (2D). Les écoulements sont de type faiblement compressible. De plus, l'échelle où se situe le travail est l'échelle mésoscopique, comme la méthode numérique choisie est la LBM. En supplément, la surface solide est supposée plane. En outre, l'écoulement de fluide est considéré isotherme. Enfin, le système fluidique est supposé contenir deux fluides immiscibles.

1.4 Plan du mémoire

Pour atteindre les objectifs soulignés, le travail à réaliser sera divisé en différentes étapes. Le contenu des chapitres subséquents est le suivant. Le **Chapitre 2** présente une revue de littérature. Les travaux jugés pertinents en ce qui concerne la simulation des écoulements multiphasiques avec la LBM, les avancées réalisées dans la CGM, la modélisation de la mouillabilité, puis la simulation numérique du phénomène d'impact sur un bord solide, sont exposés. Le **Chapitre 3** inclut la théorie sur la méthode de Boltzmann sur réseau. Il dévoile l'origine de la LBM, son processus de base, les équations macroscopiques correspondantes, ses principaux atouts et quelques-unes de ses potentielles limitations. Ensuite, le **Chapitre 4** couvre la vérification du modèle numérique à deux phases, en régime stationnaire principalement et en se concentrant sur les phases de type fluide et l'interaction qui en découle. Les résultats présentés proviennent des simulations réalisées avec deux outils numériques développés, inspirés de deux modèles récemment publiés dans la littérature. Des cas tests démontrant la capacité des deux modèles programmés à simuler des rapports de masses volumiques et de viscosités cinématiques élevés sont menés. Le **Chapitre 5**, quant à lui, discute de la modélisation numérique du contact fluide-solide d'une gouttelette en régime stationnaire. Une technique géométrique corrective est implémentée. Par ailleurs, le **Chapitre 6** couvre les premiers résultats obtenus pour la simulation du phénomène d'impact de gouttelette sur une surface solide. Des comparaisons qualitatives sont effectuées avec un travail antérieur. Le chapitre achevant ce travail présente les conclusions tirées, certaines recommandations à prendre en considération, et les travaux futurs envisageables à réaliser à moyen et long terme.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

Dans un premier temps, une revue de littérature est effectuée. Les principaux travaux abordés emploient la LBM, en particulier la méthode du gradient de couleur, ainsi que les modèles de mouillage. Les sections sont organisées comme suit : La revue traite d'abord les écoulements multiphasiques, détaillant les modèles développés pour ces applications, y compris les avancées, les questions clés et le modèle choisi pour le projet. La discussion porte principalement sur la méthode du gradient de couleur. Puis, des travaux traitant le phénomène de la mouillabilité sont évoqués. Enfin, des exemples de travaux sur la modélisation du phénomène d'impact de gouttelettes avec la LBM sont présentés. Il est proposé en plus de rappeler les objectifs poursuivis du projet de recherche mené.

2.1 Vers les écoulements multiphasiques

Les écoulements en dynamique des fluides ont différentes classifications. Il est possible par exemple de les caractériser par des écoulements compressibles ou incompressibles, ainsi que des écoulements monophasiques ou multiphasiques. Si le nombre de *Mach* respecte la condition $0 < \text{Mach} \leq 0.3$, l'écoulement est considéré faiblement compressible (également appelé *pseudo-compressible*). Par ailleurs, une phase désigne une quantité homogène isolée de matière. Pour simplifier, un solide, un liquide ou un gaz est un exemple trivial de phase. Une phase peut être caractérisée par des propriétés physiques telles que la masse volumique et la viscosité dynamique. Cette dernière indique la résistance d'un fluide à l'écoulement sous l'effet d'une force ou d'une contrainte, comme celle de cisaillement. Comme le problème initial à résoudre implique la présence d'au moins deux phases distinctes, il sera nécessaire de travailler avec des écoulements multiphasiques.

Les écoulements peuvent aussi être internes ou externes. Par exemple, un écoulement autour d'une aile d'avion est un écoulement externe [24]. En outre, en présence de différents composants, le terme *écoulement multicomposant* est utilisé. Dans ce fluide, différentes espèces chimiques coexistent. Elles peuvent être homogènes, comme l'air, ou hétérogènes, comme un écoulement avec l'huile et l'eau. De nombreux auteurs affirment que chacun desdits composants ne peut être converti en un autre. Un écoulement multicomposant peut néanmoins rester monophasique dans le cas où tous les composants appartiennent à la même phase. Il suffit de considérer que tous les composants sont des liquides, par exemple, avec des propriétés physiques relativement proches, mais encore différentes. Avec la présence de phases distinctes, une complexité s'ajoute, celle de la prise en compte des interactions entre les phases [20].

Le nombre d'articles sur la méthode de Boltzmann sur réseau et ses applications, en particulier dans les applications multiphasiques complexes, augmente de manière significative chaque année. C'est parmi les types d'applications les plus populaires de la LBM [20]. Cette section donne donc un aperçu théorique de certains des modèles développés dans ce contexte. L'un des principaux défis de la simulation des écoulements multiphasiques consiste à suivre avec précision la topologie dynamique des interfaces entre les phases, qui évoluent et interagissent continuellement lorsque les fluides sont en mouvement. D'autres problèmes se posent en présence de deux phases distinctes ou plus, comme l'apparition des courants parasites, qui seront également abordés.

2.2 Modèles multiphasiques

Un grand nombre de modèles a été présenté dans la littérature. Les modèles jugés les plus pertinents sont regroupés comme suit : le modèle de Shan-Chen, le modèle d'énergie libre et le modèle de champ de phase, et enfin, le modèle de la méthode du gradient de couleur. Perez [16] considère que les modèles multiphasiques conventionnels liés à la LBM peuvent être divisés en deux catégories : le suivi de l'interface et la capture de l'interface. Les quatre modèles évoqués appartiennent à la catégorie des méthodes de capture de l'interface. La section subséquente 2.3 sera dédiée à la revue du quatrième modèle.

Le modèle de Shan-Chen est l'un des modèles les plus populaires. Il a été développé à l'origine par Shan et Chen [25] en 1993. Leur modèle est compatible avec les écoulements contenant plusieurs phases ou composants, qui peuvent être non miscibles et avoir des propriétés de masse différentes. Un écoulement non miscible est un écoulement dans lequel les phases ne se mélangent pas. Chaque ensemble de particules d'une phase reste séparable de celles d'une autre phase. Le modèle de Shan-Chen convient aux fluides non idéaux. Il s'agit d'une approche "*bottom up*" : les auteurs postulent des interactions microscopiques entre les particules, puis ils injectent la thermodynamique des systèmes multiphasiques à partir de ces interactions [20].

Un deuxième modèle dans la littérature est le modèle de l'énergie libre. Ce modèle se distingue de ses concurrents par sa cohérence thermodynamique, dans leur forme classique [20]. Deux fonctions de distribution sont utilisées, pour prédire la vitesse sans tenir compte du gradient de pression, et pour définir chaque phase avec un paramètre d'ordre. Une équation de type Poisson est résolue à chaque pas de temps, permettant d'estimer la vitesse et surtout la pression [16].

Un troisième modèle est le modèle de champ de phase. Dans ce cas, l'état local de la matière est représenté par un paramètre d'ordre, qui simule la transition entre différentes phases ou

états, et qui dépend de l'espace et du temps. Une valeur maximale de ce paramètre indique la présence complète d'une phase à cet endroit. Une valeur minimale est attribuée exclusivement à la deuxième phase. Ce formalisme découle des approches théoriques classiques de van der Waals et de Cahn-Hilliard, comme l'expliquent les travaux de Li *et al.* [26]

Un certain nombre de limitations peuvent être relevées lors des simulations des écoulements multiphasiques, notamment les courants parasites et l'incohérence thermodynamique qui découle d'un choix de masse volumique de référence différent de 1, et qui contredit l'équilibre généré par la construction de la surface égale de Maxwell [20]. Les courants parasites (*spurious currents*) forment un écoulement excédentaire artificiel, principalement situé à l'interface. Ces courants artificiels peuvent se manifester dans les cas impliquant des gouttelettes ou des bulles statiques. Elles résultent d'un déséquilibre entre la différence de pression et la tension interfaciale, ce qui entraîne une instabilité numérique. Ce défi est critique, car il s'aggrave avec l'augmentation des rapports de masses volumiques. De plus, il devient difficile de les distinguer à mesure qu'ils s'intensifient.

De plus, les modèles multiphasiques sont confrontés à des rapports de masses volumiques et de viscosités limités. En outre, le couplage entre certaines propriétés est souvent nécessaire, ce qui représente un inconvénient s'il est souhaité de les varier séparément.

Il est à mentionner que l'isotropie est un élément clé dans la résolution de ce type de problèmes, sans oublier éventuellement le raffinement du maillage. L'isotropie peut se référer ici à la façon dont le modèle LBM est construit en termes de discrétisation de la force d'interaction dans le modèle Shan-Chen par exemple, permettant la réduction des courants parasites [27].

Yang et Boek [28] ont réalisé une étude comparative entre trois modèles différents, à savoir le modèle de Shan-Chen, le modèle de l'énergie libre et un troisième modèle appelé la méthode du gradient de couleur. Le second modèle semble être numériquement plus stable dans le cas des écoulements avec des phases ayant des masses volumiques différentes, mais en gardant un rapport de viscosités cinématiques unitaire. Le modèle CGM a connu de nombreuses améliorations récentes et a gagné en popularité ces dernières années. Compte tenu du potentiel de ce modèle pour l'avenir et de sa stabilité prometteuse, la CGM fera l'objet d'une étude plus détaillée avec la section suivante.

2.3 Progrès de la méthode de gradient de couleur

Un quatrième groupe de modèles suscite toujours un intérêt croissant : la méthode du gradient de couleur (*Color-Gradient Method* ou CGM). Elle appartient à la famille des modèles multiphasiques de Rothman et Keller (RK). Cette section présente les aspects fondamentaux

de l'approche CGM, en soulignant les contributions des différents auteurs, les applications de cette approche, et les enjeux actuels.

2.3.1 Travaux réalisés

En 1988, Rothman et Keller [29] ont proposé le premier modèle de gaz sur réseau multicomposants. La règle de collision est basée sur le principe de minimisation et de conservation de la masse (nombre de particules) et de la quantité de mouvement. Plus tard, Gunstensen *et al.* [30] ont amélioré le modèle en ajoutant un opérateur de collision à l'équation de Boltzmann, représentant la collision d'un fluide binaire. Leur modèle a été considéré comme le premier modèle LBM multiphasique. Ils ont pu dériver une valeur théorique pour le coefficient de tension interfaciale. Ce travail se limite toutefois à des cas en 2D. Un an plus tard, ils ont réussi à étendre le modèle aux cas 3D, même s'ils n'ont pas nécessairement exposé la différence entre les deux algorithmes 2D et 3D, se limitant à prouver la validité de leur modèle avec différentes mesures numériques et prédictions théoriques [31]. D'autre part, un travail intéressant de Kono *et al.* [32] a proposé un modèle LBM multiphasique couplé à une transition de phase, en tenant compte du processus d'échange de masse. La particularité de ce travail est l'introduction de la thermodynamique dans le modèle RK. Néanmoins, ils ont remarqué que l'étape de recoloration est ardue du point de vue de la programmation. Latva-Kokko et Rothman [33] ont alors proposé des suggestions, rendant sa mise œuvre plus simple, ainsi qu'une amélioration en incorporant un ajustement de l'épaisseur de l'interface.

Par la suite, les travaux de Leclaire, en collaboration avec d'autres auteurs, ont apporté des contributions significatives au modèle CGM. L'un des premiers travaux était basé sur le modèle RK, avec quelques modifications pour l'intégrer au modèle de Reis et Phillips, qui appartient à la même famille [34]. Ils ont ensuite montré que la discrétisation isotrope du gradient de couleur améliore la robustesse de la méthode. L'erreur de discrétisation associée à ce gradient possède une meilleure invariance [35].

Des travaux ultérieurs ont montré qu'il est possible de traiter des cas avec des rapports de masses volumiques et de viscosités assez élevés, de 1000 et 100 respectivement. Une condition à respecter pour la précision du modèle présenté dans ce travail est que la quantité de mouvement doit être théoriquement nulle en régime permanent. Le modèle fournit des résultats assez précis pour des rapports de masses volumiques unitaires. Il a également été déduit qu'il est plus facile de travailler avec deux phases qu'avec plusieurs, car les opérateurs de collision doivent être appropriés et généralisés pour chacune des phases [36]. Dans ce travail, des écoulements multiphasiques (plus que 2) ont été étudiés, impliquant trois fonctions de distribution de probabilité différentes. Une solution pour simuler des écoulements de rapport de masses volumiques non unitaire consiste à modifier la fonction de distribution d'équilibre

originale. Le but est de mieux respecter l'invariance galiléenne. Il a été possible de capturer la discontinuité qui peut apparaître dans certains cas, notamment celui de l'écoulement de Couette.

Par la suite, d'autres améliorations ont été apportées au modèle, en introduisant un facteur de relaxation plus développé, à temps multiple (*multi-relaxation time* ou MRT) [37], en implémentant correctement la condition initiale [38], et en essayant d'améliorer le modèle pour pouvoir ajouter une source externe de force telle que la gravité pour gérer la dynamique des interfaces liquide-liquide [39]. Globalement, l'étape de collision-propagation du modèle de Leclaire *et al.* [40] peut être subdivisée en quatre étapes : collision monophasique, perturbation, recoloration et propagation. La tension interfaciale est prise en compte par l'opérateur de perturbation. Comme dans les modèles précédents, la recoloration assure l'allocation maximale de la couleur à l'interface vers la région occupée par la phase de la même couleur, tout en préservant la masse et la quantité de mouvement totale. Pour chaque fluide particulier, la dynamique de la quantité de mouvement n'est pas prise en compte dans ce modèle [41].

Subhedar [42] a récemment (2022) développé un modèle alternatif. Les principales différences avec le modèle de Leclaire *et al.* sont les suivantes : la mobilité de l'interface est spécifiée indépendamment du rapport de masses volumiques du fluide, le calcul des forces est explicite, prenant en compte la tension interfaciale, la viscosité, la pression et les forces corporelles telles que la gravité, et le modèle exploite la fonction de distribution d'équilibre basée sur le champ de vitesse précédemment proposé par Zu et He [43] de la famille de champ de phase. De plus, les informations stockées ne concernent que la phase à plus forte masse volumique et la population sans couleur (*color-blind*). Au lieu de coupler la pression et la vitesse, Subhedar procède par itérations jusqu'à ce que les champs de pression et de vitesse convergent, après avoir évalué le champ de couleur, le gradient de couleur et le Laplacien du champ de couleur.

En effectuant divers cas tests, il a démontré que les rapports de viscosités et de masses volumiques peuvent être augmentés jusqu'à une certaine limite supérieure de minimum 1000, à des nombres de Reynolds atteignant 3×10^3 , dans des cas spécifiques à la simulation des régions internes sans conditions de bord complexes. De plus, l'article de Subhedar comprend une description mathématique riche, depuis la représentation récursive des populations totales jusqu'au développement de l'équation régissant l'évolution de la couleur.

La méthode prend en compte la dynamique macroscopique sans utiliser une approche perturbative (le cas de l'analyse de Chapman-Enskog). Elle bénéficie de l'expansion de la série de Taylor autour des populations d'équilibre. Cependant, comme le modèle est relativement récent, la vérification avec des applications complexes n'est pas présente, comme c'était le cas pour les derniers travaux de Leclaire *et al.*

2.3.2 Applications

Ce qui peut être intéressant à explorer, c'est le type d'applications que la CGM peut réaliser. Elles sont diverses. Elles comprennent le cas de la gouttelette stationnaire, la translation de la gouttelette sous le champ de vitesse forcé, l'écoulement de Poiseuille en couches, l'instabilité de Rayleigh-Taylor et l'intrusion capillaire. L'instabilité de Rayleigh-Taylor concerne la capacité du modèle à traiter les cas de deux fluides avec contraste de masse volumique sous l'influence d'un champ externe, tel que la gravité. Le dernier test permet d'examiner le modèle à faible nombre de Reynolds et le modèle capillaire : Une légère perturbation de la forme de l'interface entre les fluides initie une interaction entre la tension interfaciale, les forces visqueuses et inertielles, pouvant conduire à la pénétration du fluide ayant la masse volumique élevée dans le fluide avec celle la plus faible [42].

Une autre application intéressante est la coalescence de bulles : deux bulles de mêmes masses volumiques dans un fluide de masse volumique différente, simulant la collision de deux cylindres 3D de longueur infinie [34]. L'application de l'écoulement de Couette ou de Poiseuille sont également pertinentes. En les simulant, les auteurs peuvent montrer que leur modèle CGM est capable d'inclure un terme source et de capturer la discontinuité émergente.

Par ailleurs, Leclare *et al.* [35] ont réalisé un exemple de simulations de bulle en régime stationnaire. Enfin, avec l'ordre et la formulation appropriés du gradient de couleur, il a été possible de capturer adéquatement des cas avec un rapport de masses volumiques élevé, soit de 1000. Ils ont ultérieurement étendu leur étude et réussi à modéliser le cas des gouttelettes stationnaires avec différents angles de contact et des frontières curvilignes [44].

2.3.3 Limitations surmontées et défis actuels

Comme certains auteurs l'ont souligné, la CGM peut souffrir d'instabilité numérique dans des simulations multiphasiques complexes. Cela ne nuit pas à sa précision. Il est proposé d'indiquer certaines limitations auxquelles les premières versions des modèles CGM ont été confrontées. Par exemple, la méthode n'est pas toujours capable de simuler des rapports de masses volumiques élevés, comme c'était le cas dans l'écoulement de Couette à plusieurs couches. En outre, la nature de certaines simulations, considérant le saut de masse volumique d'une phase à l'autre, donne lieu à un problème de discontinuité. Plusieurs versions du modèle CGM ont réussi à capturer cette discontinuité (comme dans [45], [46], et [47]). De plus, l'opérateur de collision utilisant le terme classique génère souvent des simulations instables à faible viscosité [36]. Une autre limitation surmontée est l'épinglage du réseau, qui fixe l'interface. Une solution a été d'envoyer seulement une fraction de particules d'une phase

selon une direction, ce qui assure un déplacement lent mais non nul de l'interface, comme dans [48]. En ce qui concerne la limitation potentielle du rapport de viscosités cinématiques, il a été montré que la CGM traite mieux les rapports de viscosités élevés, si elle est comparée à d'autres modèles tels que le modèle de Shan-Chen [28]. Cette liste de restrictions a donc été traitée et en grande partie résolue.

D'autre part, le gradient de pression ne doit pas être élevé, dans les limites de faible compressibilité, et de l'échelle mésoscopique, pour que la théorie cinétique soit valide et que les équations N-S soient recouvertes dans la région à une phase [41]. Les méthodes développées sont confrontées dans de nombreux cas à la présence de courants parasites, ayant en commun une tension interfaciale élevée avec un déséquilibre important entre les forces à l'interface, similaire à d'autres modèles multiphasiques. Tant que la magnitude de ces courants est faible, les problèmes numériques seront adéquatement résolus, surtout dans le cas des écoulements stationnaires et/ou statiques. Par ailleurs, un défi actuel majeur est le couplage entre la pression, la masse volumique et la vitesse du son du réseau c_s . L'augmentation du rapport de masses volumiques d'un écoulement fluide conduit potentiellement à dépasser la limite d'un écoulement faiblement compressible ($Mach \ll 1$), ce qui est une hypothèse supposée dans de nombreux modèles CGM, comme celui du travail de Leclaire *et al.* [35], présentant un modèle robuste et stable à des rapports de masses volumiques unitaires, adapté à des rapports de viscosités cinématiques variées. Par conséquent, comme l'explique Subhedar [42], le respect d'un nombre de *Mach* faible signifie que la vitesse maximale dans la phase lourde devient limitée, pour les modèles adoptant la relation des gaz impliquant la masse volumique et la vitesse du son, assurant un équilibre mécanique de la force de pression à vitesse nulle entre deux phases à contraste de masse volumique. Ceci limite le rapport de masses volumiques. Subhedar utilise une formulation de la distribution d'équilibre ne mettant pas en jeu la masse volumique de chaque phase, cherchant plutôt à modéliser l'évolution du champ de phase. Ainsi, même si le modèle de Subhedar emploie aussi la relation idéale d'un gaz isotherme pour définir la pression, l'hypothèse d'un écoulement faiblement compressible est retenue malgré la présence d'une masse volumique élevée dans une phase. Ceci a été possible en modifiant la fonction de distribution d'équilibre basée sur la vitesse, sans masse volumique, pour pouvoir découpler la masse volumique et la pression. De plus, les courants parasites sont démontrés faibles dans le modèle de Subhedar.

2.4 Travaux autour de la modélisation de la mouillabilité

Dans le domaine des écoulements multiphasiques, la mouillabilité est une propriété cruciale qui décrit la force de l'interaction d'un fluide avec une surface solide. Cette propriété est

essentielle lors de la modélisation des écoulements multiphasiques, en particulier lors de l'utilisation de la LBM. Sa modélisation est rapportée être relativement complexe.

La mouillabilité est un phénomène physique résultant du contact entre des régions solides et des phases fluides. Elle se produit généralement lorsque deux phases fluides (par exemple l'air, l'eau, etc.) sont en contact avec une surface solide. Sa modélisation peut être considérée comme complexe, relativement aux conditions limites classiques telles que l'imposition de la vitesse ou de la caractérisation périodique de l'écoulement, etc., pour modéliser des scénarios multiphasiques. La technique la plus courante pour représenter la mouillabilité consiste à définir un angle de contact.

Ce dernier est issu de la stabilité numérique entre trois phases (par exemple, une phase liquide de haute masse volumique, une phase liquide de faible masse volumique ou une phase vapeur, et une phase solide). L'angle de contact doit être modélisé de manière adéquate par une condition limite supplémentaire d'un point de vue numérique : la condition limite de mouillage. Il est considéré comme un angle de contact statique au repos, en absence de mouvement dynamique significatif de l'écoulement.

En fait, à l'échelle mésoscopique, les écoulements sont généralement lents. Et comme la présence de phases différentes génère des tensions aux interfaces, ces écoulements sont dominés par les forces capillaires. La mouillabilité de la surface solide joue donc un rôle crucial dans le passage d'une phase à l'autre. Les interactions liquide-solide sont au cœur des produits mésoscopiques, microscopiques et nanoscopiques. La propriété de mouillabilité de la surface solide (hydrophile, hydrophobe, etc.) influence directement la forme finale de la phase liquide [49].

La présence de phases différentes génère une tension à l'interface, c'est-à-dire qu'à cette surface (ou ligne en 2D), une force de tension naît de l'interaction moléculaire de deux phases et est provoquée par un saut de pression. Ces écoulements sont dominés par les forces capillaires. La variable de tension interfaciale σ est alors considérée. Elle est parallèle à l'interface, comme l'ont démontré Marchand *et al.* [2]. Leur étude a adopté l'approche de la physique thermodynamique et de la physique statistique. Ce parallélisme est dû à une force d'attraction non isotrope, résultant de l'absence de liquide au-dessus de l'interface liquide-gaz ou liquide-solide. Une représentation descriptive des forces en jeu est présentée à la Figure 2.1.

Sans entrer dans les détails (par exemple la section 9.1.2 de [20]), les forces de tension interfaciale, compte tenu toujours de la stabilité mécanique, suivent la loi de Young en faisant intervenir l'angle de contact statique :

$$\cos(\theta_c) = \frac{\sigma_{sl} - \sigma_{sh}}{\sigma_{lh}} \quad (2.1)$$

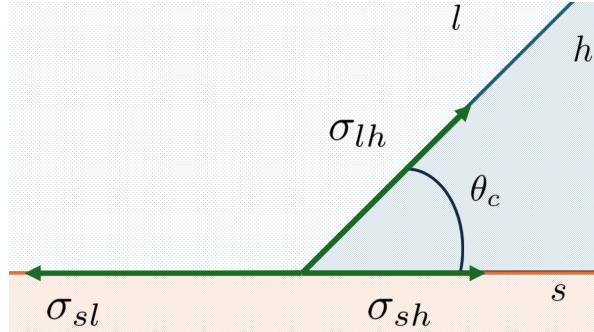


FIGURE 2.1 Force d'équilibre des tensions interfaciales à l'interface (loi de Young) [2]. Les forces de tension sont σ_{sh} , σ_{sl} et σ_{lh} entre $s-h$, $s-l$ et $l-h$ respectivement. Les trois phases dans ce cas sont la phase à haute masse volumique h (*high*), la phase à faible masse volumique l (*low*), et la phase solide s (*solid*)

De nombreux travaux antérieurs ont intégré les conditions limites de mouillage dans différents modèles LBM multiphasiques (champ de phase, Shan-Chen, CGM, etc.). Tout d'abord, dans le cadre du modèle de champ de phase, les travaux de Jacqmin [50] et de Fakhari *et al.* [51] ont cherché, en première approche, à imposer l'angle de contact directement à la frontière solide. Le but est de disposer d'une formulation adéquate pour estimer le paramètre d'ordre, utilisé pour la caractérisation des phases, par des approximations d'interpolation. Deuxièmement, d'autres scientifiques ont cherché à mettre en œuvre la condition limite de mouillabilité avec le modèle de Shan-Chen. L'angle de contact est généralement lié à la force de l'interaction fluide-solide. Cependant, la valeur de l'angle de contact dans ce cas n'est pas connue en avance. Cela est dû au fait que le modèle de Shan-Chen est une approche ascendante, dans laquelle les variables macroscopiques ne peuvent pas toujours être spécifiées avant d'analyser les interactions microscopiques. Un coefficient d'intensité d'interaction est utilisé pour contrôler l'angle de contact, permettant d'évaluer la force d'interaction entre le fluide et le solide en contact.

Chen *et al.* [49] et Huang *et al.* [52] ont réussi à mettre en œuvre un schéma empirique pour le déterminer à l'avance. En supposant une masse volumique virtuelle du solide, Chen *et al.* [49] ont introduit un degré de liberté supplémentaire. Li *et al.* [53], quant à eux, ont suggéré de fixer la masse volumique du solide à celle du noeud du fluide voisin. Par la suite, le schéma a été amélioré en le basant sur la masse volumique moyenne des liquides voisins, en réduisant les courants parasites et en incluant la couche de transfert de masse à la frontière solide. Dans ce qui suit, l'accent est mis sur les travaux réalisés dans les modèles LBM où chaque fluide se voit attribuer une couleur distincte.

Latva-Kokko *et al.* [33] ont adopté une approche attrayante capable de définir adéquatement

ce type de conditions limites tout en étant compatible avec l'approche LBM. Il s'agit d'attribuer des couleurs à chacune des phases, et de donner des masses volumiques fictives aux nœuds du maillage représentant la partie solide du domaine, après avoir calculé un gradient de couleur au voisinage de ces nœuds. Cela permet de décrire la fonction de couleur ou, par équivalence, la masse volumique à un endroit donné. Cette méthode était alors populaire et largement utilisée, bénéficiant de sa facilité de mise en œuvre. Malgré cela, elle s'est avérée inexacte dans certains cas en raison de la présence d'un transfert de masse non physique le long de la frontière solide [44].

Un autre travail à noter est celui de Leclaire *et al.* [40], qui a développé une méthode alternative qui diffère quelque peu des formulations précédentes pour simuler la mouillabilité. Cette approche repose sur la détermination de la direction appropriée du gradient de couleur en établissant une relation de récurrence pour la méthode de la sécante. Le principal inconvénient de cette approche est son coût de calcul, en raison du nombre élevé d'itérations requises par la relation de récurrence. Toutefois, cela n'enlève rien aux points forts de la méthode, tels que la précision des résultats.

Akai *et al.* [46] ont essayé de développer un modèle relativement différent, avec le même but de trouver une orientation adéquate du gradient du champ de couleur. Ils en ont déduit une évaluation précise des angles de contact pour les problèmes statiques. L'idée derrière leur approche est simple : imposer directement l'angle de contact. Ceci est réalisé en changeant la direction du gradient de couleur à la frontière en fonction d'un angle de contact spécifique. Comme Leclaire *et al.* [44], Akai *et al.* [46] ont réussi à prouver que la méthode précédente de masse volumique fictive conduit à des angles de contact s'écartant de l'angle prescrit, qu'il soit inférieur ou supérieur à 90 degrés, ce qui entraîne une estimation inexacte de la pression capillaire. Un autre aspect important est la présence de courants parasites moins importants autour de la ligne de contact à trois phases. Par conséquent, l'évaluation de la vitesse du fluide est moins affectée par ces courants.

La méthode de Boltzmann multiphasique proposée par Akai *et al.* est basée sur une approche de Brackbill *et al.* [54] par gradient de couleur destinée aux applications 2D, dans laquelle la tension à l'interface entre les deux fluides est modélisée par une force de surface continue (CSF). En outre, ils s'inspirent du modèle de Xu *et al.* [55], qui ont proposé une transformation vectorielle du vecteur normal au solide, perpendiculaire à la paroi solide, par l'angle θ , qui fonctionne de manière adéquate pour les problèmes bidimensionnels : la direction imposée du gradient de couleur est simplement la rotation du vecteur normal à la frontière en fonction de l'angle de contact. Leur modèle utilise une équation de transformation vectorielle adaptée aux scénarios 2D, permettant d'ajuster l'orientation du gradient de couleur pour

imiter l'angle de contact imposé. Cela explique l'utilisation d'un modèle de réseau *D2Q9*. Akai *et al.* [46] ont utilisé un modèle de réseau *D3Q19* parce que leur modèle inclut une condition limite appropriée qui peut gérer des géométries tridimensionnelles complexes. Le modèle peut être facilement adapté aux applications 2D.

Une étude récente de Wang *et al.* [56] s'est concentrée sur le traitement de la dynamique de la ligne de contact, en particulier pour les géométries multidimensionnelles curvilignes. Le modèle est constitué d'une association de la formulation géométrique et du schéma de mouillabilité à correction prédictive. L'avantage de cette approche est qu'elle évite de rechercher le vecteur normal approprié des solutions possibles, comme c'était le cas pour Akai *et al.* [46]. Les cas tests établis montrent une cohérence entre les résultats numériques et les solutions analytiques. Il aurait été plus bénéfique de disposer de cas tests similaires pour confirmer ou infirmer la capacité du modèle à fournir de meilleurs résultats que celui d'Akai *et al.*, mais l'intention des auteurs est simplement de vérifier leur modèle.

2.5 Dynamique de l'impact avec la méthode de Boltzmann sur réseau

Après la discussion sur divers travaux de la LBM en écoulement multiphasique, il est intriguant d'examiner de plus près les travaux réalisés avec la LBM dans le contexte de l'impact des gouttelettes, soit la théorie présentée dans la section 1.1.

Concernant le modèle de l'énergie libre, le travail de Shao *et al.* [57] est à mentionner. Les auteurs ont montré que la LBM, dans le contexte des écoulements multiphasiques, est capable de gérer les cas d'éclaboussures de gouttelettes, notamment sur une surface mouillée. Leur travail a démontré que le rapport de masses volumiques peut être élevé, si un compromis avec le temps de calcul est accepté. Le nombre de Weber a été fixé à 5000 et le nombre de Reynolds maximum atteint est de 1000. Ce type d'application est possible, à condition d'introduire une matrice de relaxation MRT.

D'autre part, Fakhari *et al.* [51] ont appliqué avec succès un modèle MRT de champ de phase au cas du mouillage et du démouillage de gouttelettes sur une surface plane, sur une surface cylindrique, et à sa chute sur des cylindres hydrophiles ($\theta_c < 90^\circ$) et superhydrophobes ($\theta_c > 150^\circ$). Dans leur premier cas test, les rapports de masses volumiques et de viscosités atteignent respectivement 1000 et 100. Ce sont les mêmes ratios simulés pour le dernier cas test d'une gouttelette en chute sous champ gravitationnel et impactant un cylindre circulaire. En revanche, le nombre de Reynolds reste plutôt limité à une valeur intermédiaire dans ce dernier cas test, une faiblesse potentielle de leur modèle, ne dépassant pas une valeur de 25.

De plus, Wang *et al.* [58] ont réussi à développer une version 3D du modèle MRT avec un

réseau *D3Q15*. Il a été utilisé pour tester le cas des éclaboussures de gouttelettes. Pour l'impact sur une surface solide, le nombre de Weber simulé est de 103, avec un nombre Reynolds de 685, et un rapport de masses volumiques de 841.8. Ceci est intéressant car les valeurs de ces nombres adimensionnels sont relativement grandes. Ils mentionnent que l'épaisseur de l'interface est un élément important à prendre en compte, puisqu'il est nécessaire de poser une interface assez fine. La raison est la présence d'interactions d'interface complexes et l'apparition de plus petites gouttelettes. L'angle de contact d'équilibre est 107°.

Il convient aussi de mentionner le travail de Deng *et al.* [13], qui ont mis en œuvre une méthode de champ de phase conservatif, dans le but d'étudier le comportement de la dynamique des gouttelettes, tout en essayant d'augmenter le rapport de masses volumiques entre la gouttelette et le support sur une longue période. Le rapport de masses volumiques atteint dans le mécanisme de rebond est de 6400.

Finalement, il est déduit que le modèle de Shan-Chen est plus abondant dans l'étude de l'impact de gouttelette, surtout durant la dernière décennie. Chen *et al.* [49] ont décrit certaines applications pertinentes impliquant le comportement des gouttelettes, qu'il s'agisse de glissement sur une surface solide, d'impact sur une surface sèche, de formation et de contrôle des gouttelettes, de suspension sur un fluide non miscible, etc. Un travail plus ancien à citer est celui de Kang *et al.* [59], sur le déplacement des gouttelettes le long d'un canal bidimensionnel. Les auteurs ont montré l'importance du nombre adimensionnel de Bond, représentant le rapport des forces gravitationnelles aux forces capillaires. Pour de petites valeurs de ce paramètre et un angle de contact inférieur à 90°, la longueur de mouillage avec la paroi diminue avec le temps. Dans le cas contraire, des détachements sont susceptibles de se produire.

Toujours en utilisant le modèle de Shan-Chen avec la relaxation de type MRT, Yuan *et al.* [60] ont pu introduire un terme source avec une tension interfaciale ajustable, modélisant l'impact des gouttelettes sur un film liquide. Toujours en utilisant le modèle de Shan-Chen avec la relaxation de type MRT, Yuan *et al.* [60] ont pu introduire un terme source avec une tension interfaciale ajustable, modélisant l'impact des gouttelettes sur un film liquide. Ils affirment toutefois que son calcul est fastidieux. Leurs applications test sont : éclaboussure des gouttelettes sur un film, évolution de la couronne et du jet central avec différents paramètres géométriques, de Reynolds, et de Weber. Pour leur première application, le rapport de masses volumiques atteint est de 720, avec un nombre de Reynolds de 1000.

La quasi-totalité des travaux consultés présente l'étude du mécanisme d'impact en trois dimensions. Ceci s'explique simplement par le fait que le phénomène physique est de nature 3D. Une étude quantitative nécessitera alors probablement des simulations à trois axes spatiaux.

Malgré cela, Gupta et Kumar [4] ont rédigé un article, présentant leur étude 2D sur ce phé-

nomène, employant également la méthode de Shan-Chen. Le rapport de masses volumiques maximal étudié est de 10. Leurs résultats ont montré que la gouttelette suit le processus suivant : étalement jusqu'à atteindre un diamètre maximum, avant que ce dernier rétrécisse. Cette rétraction n'est pas nécessairement uniforme. Pour un nombre de Weber de 20 à 200, le profil du facteur d'étalement peut suivre le comportement illustré à la Figure 2.2.

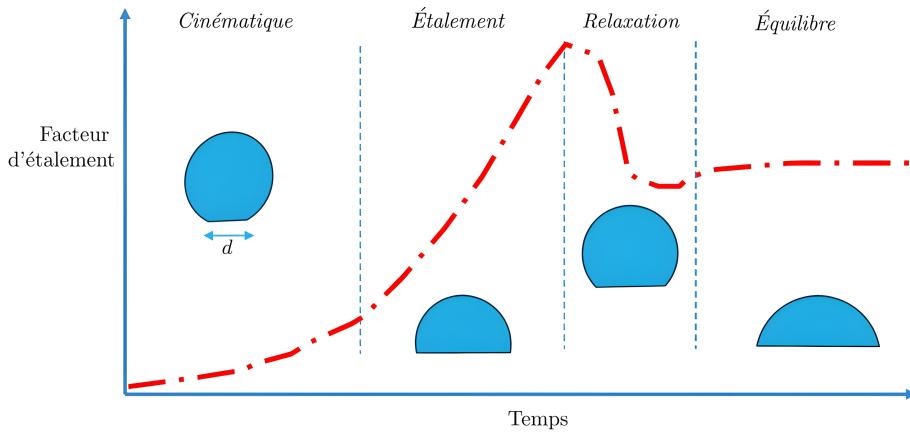


FIGURE 2.2 Profil de l'évolution temporelle du facteur d'étalement (rapport du diamètre actuel d et initial D), mettant en avant quatre moments à la suite d'impact : cinématique (*kinematic*), étalement (*spreading*), relaxation (*relaxation*), et équilibre (*equilibrium*). Le temps est souvent normalisé selon une forme adimensionnelle

En fixant le nombre d'Ohnesorge, l'évolution du diamètre d'étalement à travers le temps se situera soit à un moment cinématique, d'étalement, de relaxation, ou d'équilibre. La tendance dépendra du nombre de Weber simulé. Le taux d'étalement est influencé, selon les résultats de leur étude, par le diamètre à l'impact, la vitesse, la tension interfaciale, et la viscosité.

Pour un nombre de Weber faible ($We = 2.78$), la gouttelette agit comme un corps rigide, et le diamètre de la gouttelette ne dépassera pas le diamètre de départ. Dans ce cas, il sera plus ardu d'obtenir les quatre moments. Ceci est validé avec $Oh = 0.197$.

Comme d'autres auteurs l'ont conclu, le diamètre d'étalement est plus grand pour une surface mouillante. En ce qui concerne le rapport de masses volumiques, le moment de relaxation voit des oscillations à plus grande amplitude d'autant qu'il est élevé, à cause d'une plus faible traînée appliquée à la gouttelette. L'angle de contact a été montré non influent sur le diamètre d'étalement maximal pour un nombre de Reynolds dépassant 10. Le film d'étalement peut briser pour des surfaces neutres ou non mouillantes à des nombres de Weber et de Reynolds importants, où l'angle de contact a un effet significatif sur l'amplitude de cette rupture.

En outre, le travail de Gupta et Kumar a conclu que le nombre de Weber a un effet important sur le diamètre d'étalement. De plus, pour un nombre de Weber constant, le temps

d'étalement avant le moment d'équilibre est plus grand d'autant que le nombre de Reynolds est élevé. Le type de surface a aussi un effet considérable sur ce diamètre, surtout si l'impact est effectué à une faible inertie.

2.6 Rappel des objectifs spécifiques poursuivis

Les sections qui suivent la revue de littérature couvrent le travail issu des étapes menées pour répondre aux objectifs du projet de recherche, rappelés dans ce qui suit : En premier lieu, il s'agit de réviser la théorie générale de la LBM simple phase. En deuxième lieu, il est question d'étudier deux modèles multiphasiques CGM, en mettant l'accent sur leurs étapes de résolution, et d'effectuer des simulations numériques illustrant l'interaction fluide-fluide. En troisième lieu, le travail cherchera à incorporer une technique numérique de mouillabilité modélisant le contact fluide-solide. En quatrième lieu, l'étape finale mènera à réaliser des études qualitatives portant sur l'impact de gouttelette sur une surface solide.

CHAPITRE 3 THÉORIE SUR LA MÉTHODE DE BOLTZMANN SUR RÉSEAU

Dans ce chapitre, l'accent est mis sur la méthode de Boltzmann sur réseau à une phase dans la première section. Les informations fournies précisent l'origine de la LBM et la manière dont elle a été dérivée. Par la suite, les équations macroscopiques équivalentes sont fournies. De plus, quelques avantages majeurs de la méthode sont mentionnés, avant d'aborder quelques limitations. Enfin, les conditions aux limites généralement employées pour les écoulements à une phase sont présentés dans l'annexe A. Ces conditions limites seront utilisées lors des simulations de ce mémoire au besoin.

3.1 Vers la méthode de Boltzmann sur réseau

Comme il a été présenté précédemment, la dynamique des fluides peut être étudiée au moyen de modèles classiques de résolution des équations de Navier-Stokes, mais aussi en traitant le comportement des entités à l'échelle macroscopique comme un comportement collectif de particules à l'échelle atomique [61]. Ceci peut être réalisé en cherchant une solution à l'équation cinétique de Boltzmann. Il est donc possible d'éviter l'étude de chaque particule isolée et de suivre à la place le comportement d'un groupe de molécules. C'est ce qui a été utilisé dans le cadre de la méthode d'automates du gaz sur réseau (Lattice Gas Automata ou LGA), apparue dans les années 1970 [62], développée par Hardy, Pomeau et de Pazzis, d'où le nom de modèle HPP.

La méthode LGA est “l’ancêtre” de la LBM. Ici, il est supposé qu’il y a un gaz qui se déplace dans le réseau, évoluant selon un ensemble de règles, ce qui explique l’utilisation du terme *automate*. Le domaine spatial est subdivisé en noeuds de réseau, formant un maillage de discrétisation finie. Le temps et l’espace des phases des particules sont également discrétisés. Pour chaque noeud, le but est de déterminer si une entité l’occupe ou non, puis de simuler comment la collision se produit avec les voisins, avant de traiter la propagation. Cette dernière consiste à transmettre les particules résultant de la collision aux noeuds voisins [20]. Par conséquent, des variables booléennes (0 ou 1) sont utilisées.

Cependant, cette méthode LGA consiste en plusieurs approximations, ce qui peut nuire à la précision et à la stabilité souhaitées. Malheureusement, l’inefficacité calculatoire de la méthode peut également être due au cœur même du fonctionnement de la méthode, à savoir les calculs à l’état discret. En outre, la méthode ne récupère pas nécessairement les

équations N-S [63]. De plus, cette technique nécessite la simulation de nombreuses particules pour parvenir à une solution acceptable [21]. Par ailleurs, elle souffre de la présence de bruit statistique, en plus de la difficulté de l'étendre à des applications multidimensionnelles [64].

Compte tenu de ces limitations, une nouvelle méthode a été développée, remplaçant les nombres booléens par des populations de distribution probabiliste, dont la moyenne générera les solutions de l'ensemble du système. Cela présente un avantage important : il n'est pas nécessaire d'évaluer l'état moyen de plusieurs cellules pour déterminer le comportement macroscopique [21]. Cela implique la présence d'une variable sous forme de nombres réels entre 0 et 1, selon chaque direction disponible : un élément de 0.3 selon une direction signifie que la variable à la cellule suivra cette direction avec une probabilité de 30% [65]. Il s'agit de la méthode de Boltzmann sur réseau. Elle a marqué une amélioration considérable en termes de stabilité et a fourni un outil puissant pour des simulations de fluides plus adéquates, ayant éliminé le bruit statistique présent dans la méthode LGA. Enfin, le mode de fonctionnement de la LBM la rend bien adaptée à la parallélisation, ce qui, entre autres facteurs, améliore les performances de calcul [66].

L'article de Nourgaliev *et al.* [67] a présenté une vue d'ensemble organisée de l'origine et de l'interprétation théorique de l'équation de Boltzmann sur réseau. Il convient de rappeler que cette équation dérive de la théorie cinétique des gaz, impliquant une équation de transport dont la principale variable d'intérêt est la fonction de distribution de probabilité d'une particule, ou PDF, soit la variable f : fonction de distribution. À partir de là, l'équation de Boltzmann sur réseau peut être dérivée en supposant, premièrement, que les collisions sont de type binaire, ce qui est valable si le gaz est idéal ou au moins dilué. Deuxièmement, la vitesse d'une molécule est considérée indépendante de sa position.

Par conséquent, en procédant à des simplifications mathématiques, il est possible d'obtenir l'équation de Boltzmann sur réseau, qui est le fondement mathématique utilisé par la LBM. Il convient de mentionner que Ludwig Boltzmann est à l'origine du développement de la mécanique statistique. En effectuant une adaptation appropriée, comme par exemple l'ajout d'un tenseur de pression non idéal [20] ou le couplage avec d'autres modèles numériques [68], la LBM peut être appliquée à des gaz qui ne sont ni idéaux ni dilués.

Dans la LBM, les PDFs représentées par des nombres réels, se déplacent dans l'espace des phases selon les directions disponibles. Elles évoluent au cours du temps également. Le but est de reproduire la dynamique du fluide du système. Dans l'espace des phases, il existe q directions possibles que les variables peuvent suivre pour une cellule centrale en d dimensions, dans un modèle de vitesse $DdQq$. Différents types de réseaux discrétisés dans l'espace des phases sont utilisés, tels que $D2Q9$, $D2Q5$, $D2Q7$, $D2Q19$, etc., donnés dans la Figure 3.1.

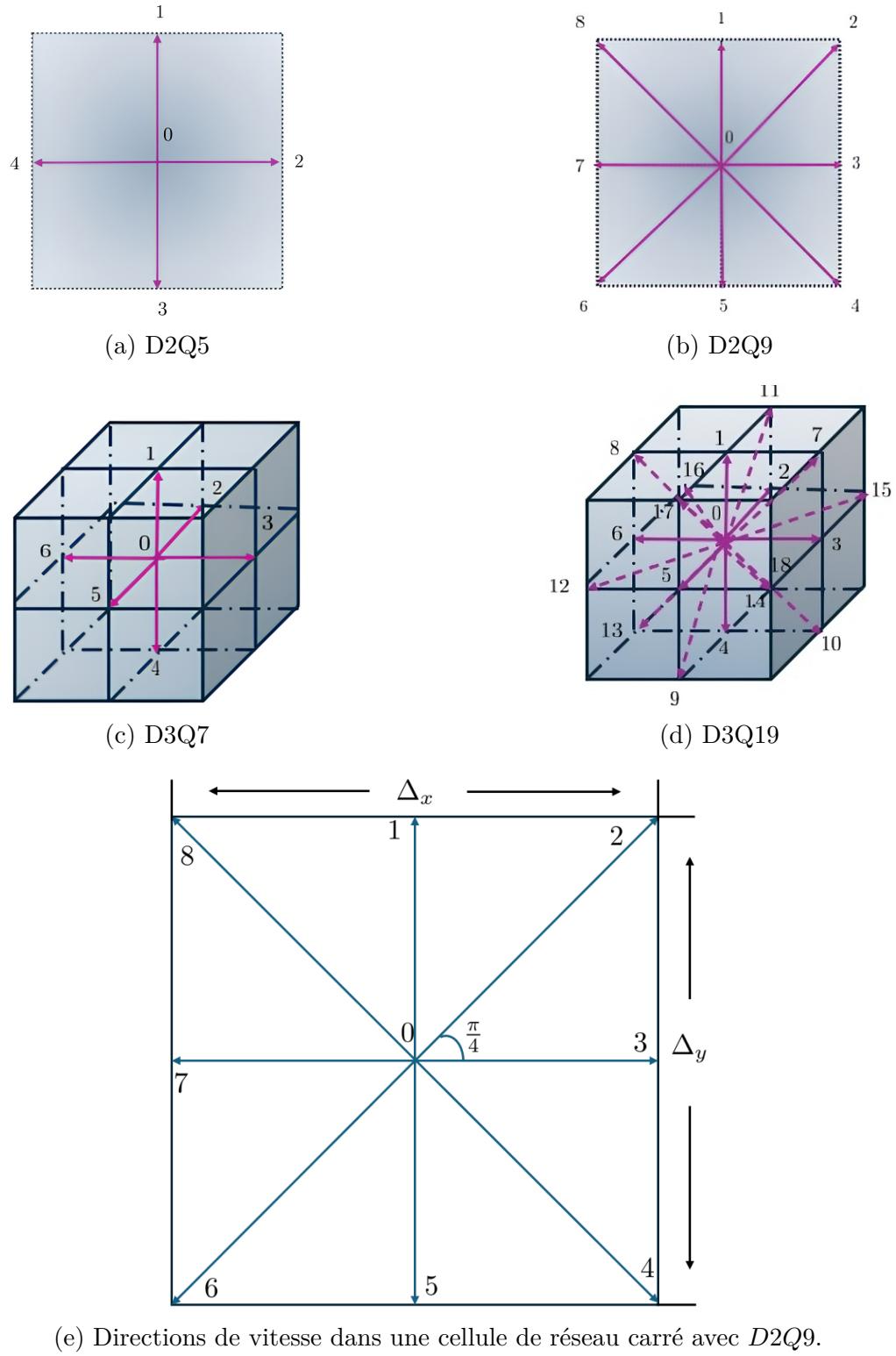


FIGURE 3.1 Modèles de vitesses obtenus par la discrétisation de l'espace des phases sur réseau Ddq : (a) $D2Q5$, (b) $D2Q9$, (c) $D3Q7$, (d) $D3Q19$, (e) Schéma directionnel du modèle $D2Q9$. Les pas d'espace sont Δx et Δy

Il convient de noter que les erreurs de discrétisation sont généralement plus faibles, que la stabilité est meilleure et que l'isotropie est renforcée pour les ensembles de vitesses de l'espace des phases mieux discrétisés. De plus, certains de ces modèles de vitesses peuvent être une projection d'un autre : $D2Q9$ est une projection de $D3Q15$ en deux dimensions [20]. Une illustration plus détaillée du modèle de réseau utilisé dans le cadre de ce travail, soit le modèle $D2Q9$, est présentée dans la Figure 3.1e.

Dans ce modèle réseau carré discrétisé dans l'espace des phases $D2Q9$, où chacune des 9 composantes du vecteur vitesse a 2 éléments, les vecteurs de connectivité peuvent être écrits comme suit :

$$\vec{c}_i \equiv [(\vec{c}_i)_x, (\vec{c}_i)_y] = \begin{cases} [0, 0], & i = 0 \\ [\sin(\theta_i), \cos(\theta_i)] c, & i = 1, 3, 5, 7 \\ [\sin(\theta_i), \cos(\theta_i)] \sqrt{2}c, & i = 2, 4, 6, 8 \end{cases} \quad (3.1)$$

où $\theta_i = \frac{\pi}{4}(3 - i)$, et $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$. Chaque direction est naturellement liée à une cellule voisine.

Pour le cas du présent travail, les unités sont mises à l'échelle avec $\Delta x = \Delta t = 1$. Les unités correspondent alors au système LBM, où le temps, la distance et la masse sont déterminées respectivement par le pas de temps (*time step ts*), l'unité du réseau (*lattice unit lu*) et l'unité de masse (*mass unit mu*), comme dans [69].

En tenant en compte de la discrétisation de l'espace des phases, l'évolution des PDFs au cours du temps repose sur deux mécanismes essentiels : la collision et la propagation. La collision représente l'interaction entre les particules. La propagation, quant à elle, correspond au transport des PDFs le long des directions discrètes du réseau, simulant ainsi le déplacement des particules dans le fluide. Ces deux étapes constituent le cœur de la dynamique décrite par l'équation de Boltzmann sur réseau. Les concepts de collision et de propagation sont utilisés dans la LBM et traités algorithmiquement. La collision est une opération algébrique locale. Les PDFs des particules en post-collision sont transmises aux nœuds environnants. Celle-ci est une opération non locale.

Considérant l'opérateur de propagation classique de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK), d'une approximation de second ordre et d'un changement de variable à des fins de mise à l'échelle des paramètres [20], la collision est formulée mathématiquement, qui devient liée à la dynamique de relaxation dans ce cas. Les étapes de collision-propagation sont dérivées mathématiquement, données par l'équation 3.2 pour l'étape de collision, et l'équation 3.3 qui sous-tend le processus de propagation. La fonction de distribution $f_i(\vec{x}, t^*)$ découle de l'étape de collision de la fonction de distribution f_i . Cette fonction post-collision $f_i(\vec{x}, t^*)$ sera propagée par la

suite avec une vitesse directive \vec{c}_i lors d'un pas de temps Δt .

$$f_i(\vec{x}, t^*) = f_i(\vec{x}, t)(1 - \frac{1}{\tau}) + \frac{1}{\tau} f_i^{(e)}(\vec{x}, t); \quad (3.2)$$

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t^*) \quad (3.3)$$

La propagation résulte en un déplacement le long d'un pas spatial $\Delta x = \vec{c}_i \Delta t$. C'est un processus de calcul direct et simple. Dans ce cas, le temps de relaxation utilisé est de type unique, ou *Single-Relaxation time* (SRT). Ces équations de collision-propagation 3.2 et 3.3 régissent la dynamique de la LBM. Les étapes sont illustrés à la Figure 3.2, soit les étapes de collision (ou de relaxation) et de propagation, au temps t (à gauche) et au temps $t + 1$ (à droite), en considérant une définition unitaire du temps $\Delta t = 1$.

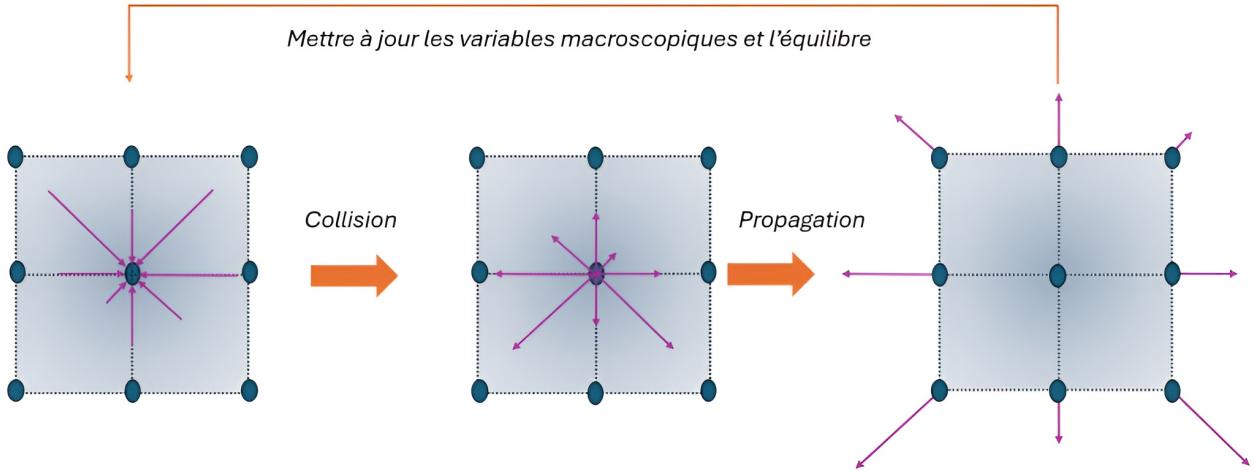


FIGURE 3.2 Étapes de collision et de propagation de la LBM en 2D et dans 9 directions (D2Q9), inspiré de [3]. La magnitude des PDFs dans une direction est arbitraire

La force de cette méthode est que l'opérateur de propagation est linéaire : les vecteurs peuvent être superposés. La variable τ est le temps de relaxation. Le processus de collision représente la tendance de la population f_i pour approcher l'état d'équilibre $f_i^{(e)}$ après un temps de relaxation τ [20]. Ce processus porte alors le nom de "relaxation" également. Le temps de relaxation est relié à la viscosité cinématique du fluide. Elle est donnée dans la LBM classique par : $\tau = \frac{1}{2} + \frac{\nu}{\Delta t c_s^2}$. Cette dernière peut également être utilisée pour formuler des critères de stabilité. Par exemple, pour un opérateur BGK, la condition $\tau/\Delta t \geq \frac{1}{2}$ est une condition à respecter pour que les populations d'équilibre $f_i^{(e)}$ aient des valeurs positives. C'est une condition nécessaire à la stabilité dans ce cas [20].

La fonction de distribution $f_i^{(e)}$ est celle désignée pour la fonction de distribution d'équilibre. Dans le cas de discrétisation standard $DdQq$ et en écoulement faiblement compressible, elle

est formulée comme :

$$f_i^{(e)}(\vec{x}, t) = W_i \rho \left(1 + \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{u}}{c_s^2} + \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2}{2c_s^4} - \frac{(\vec{u} \cdot \vec{u})}{2c_s^2} \right) \quad (3.4)$$

Les poids W_i sont spécifiques à la discrétisation de l'espace des phases choisie. Pour *D2Q9*, les poids W_i sont donnés par :

$$W_i = \begin{cases} \frac{4}{9}, & i = 0 \\ \frac{1}{9}, & i = 1, 3, 5, 7 \\ \frac{1}{36}, & i = 2, 4, 6, 8 \end{cases} \quad (3.5)$$

La fonction de distribution d'équilibre prend aussi en compte la vitesse du son $c_s = c/\sqrt{3}$ du modèle de réseau.

Sans terme source, les PDFs doivent normalement obéir mathématiquement à la conservation de la masse (moment 0) et de la quantité de mouvement (moment 1) par :

$$\sum_i f_i = \sum_i f_i^{(e)} = \rho \quad (3.6)$$

$$\sum_i f_i \vec{c}_i = \sum_i f_i^{(e)} \vec{c}_i = \rho \vec{u} \quad (3.7)$$

Les valeurs macroscopiques telles que la masse volumique ρ et la vitesse \vec{u} , peuvent être déduites des fonctions de distribution trouvées en résolvant la LBM, sachant que la somme des fonctions de distribution de toutes les cellules donne la masse volumique, et que cette même sommation pondérée par la vitesse du réseau discrétisé donne la quantité de mouvement, ce qui permet d'extraire par la suite la vitesse macroscopique du fluide. C'est ainsi que la masse volumique ρ et la vitesse macroscopique \vec{u} du fluide peuvent être récupérées.

3.2 Récupération des équations macroscopiques

Maintenant que la LBM a été présentée, il est souhaitable d'étudier si elle peut être utilisée pour simuler le comportement des fluides ou, en d'autres termes, pour retrouver les équations de Navier-Stokes (quantité de mouvement) combinées à la conservation de la masse (continuité), tout en opérant à une échelle différente. L'une des analyses réalisées à cet effet est l'analyse *Chapman-Enskog*, développée par les mathématiciens et physiciens Sydney Chapman et David Enskog [20].

Cette analyse découle de la théorie des perturbations, qui peut être comprise par le fait que si les changements d'échelle microscopiques sont très faibles, alors cette analyse est capable de toujours respecter le comportement macroscopique. Des dérivations mathématiques « complexes » ont été réalisées à cet effet. Dubois *et al.* [70] ont montré comment l'analyse de *Chapman-Enskog* et l'expansion de Taylor peuvent être utilisées pour obtenir des équations aux variables macroscopiques aux dérivées partielles équivalentes à partir de la LBM :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (\text{continuité}) \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nu \nabla \cdot (2\rho \mathbb{S}) \quad (\text{quantité de mouvement}) \quad (3.9)$$

Les équations de la quantité de mouvement ne représentent pas exactement les équations N-S. Dans l'équation de la quantité de mouvement 3.9, le terme $\mathbb{S} = \frac{1}{2} [(\vec{\nabla} u) + (\vec{\nabla} u)^T]$ fait référence au tenseur macroscopique de taux de déformation. Namvar et Leclaire [71] ont rapporté que les équations retrouvées sont spécifiques aux équations des fluides de N-S en contexte isotherme dans une limite incompressible.

Comme toute méthode numérique, la LBM classique présente certaines limitations qui restreignent son domaine d'application, notamment en ce qui concerne la compressibilité des écoulements. Le nombre de *Mach*, défini comme le rapport entre la vitesse du fluide et la vitesse du son, permet de quantifier cette compressibilité. La LBM classique est principalement adaptée aux écoulements à faible compressibilité (*pseudo-compressibles*) et à faible vitesse, car elle introduit des termes d'erreur $O(u^3)$ entre les équations de la continuité de N-S et la LBM classique incompressible [20]. Lorsque le nombre de *Mach* devient significatif ($Ma \gg 0$), ces erreurs s'amplifient et limitent la vitesse du fluide pouvant être simulée, sauf en appliquant certaines modifications à la méthode. Dans le cadre de ce mémoire, la compressibilité est considérée faible ($Ma \ll 0.3$)).

Considérant la LBM comme un outil de résolution puissant, il convient de mentionner ce qui la distingue des autres méthodes classiques. Tout d'abord, contrairement aux solveurs N-S, elle reformule implicitement le terme convectif non linéaire, tel que $(\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u}$, à travers l'évolution des fonctions de distribution, plutôt que de le discréteriser explicitement comme dans les solveurs traditionnels des équations de N-S. Deuxièmement, cette méthode, à travers les ajustements nécessaires, peut être exploitée pour les cas de fluides à l'échelle microscopique, étant donné que l'équation de Boltzmann sur réseau est basée sur la théorie cinétique. Troisièmement, la pression est simplement un produit de l'équation d'état isotherme $p = \rho c_s^2$. Enfin, même si la communication entre les noeuds par le processus de propagation est non locale, le schéma de propagation est explicite, linéaire et simple. C'est un avantage par rap-

port aux solveurs N-S de base, où une équation de Poisson doit dans la plupart des cas être résolue pour trouver la pression, qui est implicitement liée à l'équation de conservation de la masse [72].

La LBM peut nécessiter un coût de mémoire élevé, en raison du calcul des différentes valeurs de la fonction de distribution (9 pour $D2Q9$), à chaque cellule et pour différents pas de temps. Heureusement, les ordinateurs modernes sont de plus en plus puissants et disposent de plus grandes capacités de mémoire. Par ailleurs, les exigences de calcul des simulations LBM peuvent être satisfaites par la parallélisation et en tirant parti des capacités **GPU** (*Graphics Processing Unit*), dans les situations où de nombreuses tâches nécessitent des calculs simultanés [20]. Ceci est possible avec la LBM, étant donné que la convection est formulée linéairement avec un schéma explicite.

CHAPITRE 4 MODÈLES NUMÉRIQUES DE LA MÉTHODE DU GRADIENT DE COULEUR À DEUX PHASES

Après avoir dévoilé les éléments principaux de la LBM classique destinée aux écoulements monophasiques, une vérification de la capacité de chacun des deux modèles retenus à simuler des cas mettant en jeu l'interaction entre deux phases de fluide est effectuée. Les sections sont organisées comme suit : Tout d'abord, les deux modèles numériques principaux sont présentés d'un point de vue théorique : le modèle de Leclaire *et al.* [40] (**CGM I**) et le modèle de Subhedar [42] (**CGM II**). Ils sont considérés comme des modèles multiphasiques dans le cadre de la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM), plus précisément dans la famille de la méthode du gradient de couleur, ou CGM. Le modèle **CGM I** a été programmé dans une version adaptée 2D, à partir du modèle en 3D provenant du laboratoire. Le modèle **CGM II** est déjà adapté numériquement pour les cas 2D de ce chapitre issu des travaux antérieurs dans le laboratoire. La discussion porte ensuite sur une comparaison entre les deux modèles, en simulant différents cas tests. Le but est de déduire les points forts et les limites de chaque approche numérique. Ces cas tests sont : La gouttelette stationnaire (pression de Laplace), l'écoulement de Poiseuille à deux couches, et l'instabilité de Rayleigh-Taylor.

4.1 Modèle de Leclaire *et al.* : CGM I

Deux phases seront considérées dans la présentation mathématique du modèle. Dans ce cas, il existe deux fonctions de distribution de probabilité (PDF) : $f_i^k(\vec{x}, t)$. L'indice k fait référence à un fluide, qui peut être identifié par une couleur dans la CGM (rouge et bleu par exemple), ou selon la masse volumique relative, c'est-à-dire $k = h$ pour un fluide à haute masse volumique (*high density*), et $k = l$ pour un fluide à faible masse volumique (*low density*).

L'équation régissant l'évolution des PDFs lors d'un pas de temps et aboutissant à la fonction de distribution post-propagation $f_i^k(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t)$ est :

$$f_i^k(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^k(\vec{x}, t) + \Omega_i^k + F_i^k(\vec{x}, t) \Delta t = f_i^k(\vec{x}, t^*) \quad (4.1)$$

Dans la LBM, un opérateur de collision doit être défini. L'opérateur de collision Ω_i^k est utilisé dans le processus de collision d'une phase [35]. Pour l'étape de perturbation introduisant la tension interfaciale, un terme de forçage F_i^k est employé. La fonction de distribution post-collision résultante après la collision à une phase et la perturbation est $f_i^k(\vec{x}, t^*)$. Comme pour la LBM monophasique, les unités LBM sont adoptées, où $\Delta t = \Delta x = \Delta y = 1$.

4.1.1 Opérateur de collision monophasique

L'opérateur Ω_i^k peut être simplement l'opérateur standard BGK de la LBM classique avec une seule phase. Les fonctions de distribution sont relaxées vers un équilibre local, en respectant l'équation suivante :

$$\Omega_i^k = -\omega_k(f_i^k - f_i^{k(e)}) \quad (4.2)$$

Le terme ω_k est le facteur de relaxation. Il est égal à l'inverse du temps de relaxation τ_k . Le type de relaxation présenté est de relaxation simple SRT. Reis et Phillips [73] ont défini la fonction de distribution d'équilibre $f_i^{k(e)}$ comme :

$$f_i^{k(e)} = \rho_k \left(\chi_i^k + W_i \left[\frac{3}{c^2} \vec{c}_i \cdot \vec{u} + \frac{9}{2c^4} (\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2c^2} (\vec{u} \cdot \vec{u}) \right] \right) \quad (4.3)$$

La variable ρ_k désigne la masse volumique macroscopique d'une couleur de fluide. En considérant un paramètre α_k , différent dans chacune des phases k , la valeur de χ_i^k devient :

$$\chi_i^k = \begin{cases} \alpha_k, & i = 0 \\ \frac{1 - \alpha_k}{5}, & i = 1, 3, 5, 7 \\ \frac{1 - \alpha_k}{20}, & i = 2, 4, 6, 8 \end{cases} \quad (4.4)$$

En outre, la pression d'un fluide p_k peut également être calculée, avec l'expression suivante :

$$p_k = \rho_k \frac{3(1 - \alpha_k)}{5} c^2 = \rho_k (c_s^k)^2 \quad (4.5)$$

où c_s^k est la vitesse du son dans le fluide k . Les paramètres α_k ajustent la vitesse du son c_s^k dans chacune des phases. Ils permettent d'évaluer la pression hydrodynamique p_{hy} dans les régions où seulement la phase k est considérée présente.

Le rapport de masses volumiques initial λ prend la forme suivante :

$$\lambda = \frac{\rho_h^0}{\rho_l^0} = \frac{1 - \alpha_l}{1 - \alpha_h} \quad (4.6)$$

Le rapport de masses volumiques d'une simulation est donc ajusté par les masses volumiques initiales des fluides ρ_h^0 et ρ_l^0 . Une valeur d'entrée est imposée pour le paramètre libre α_l , puis le paramètre α_h est déduit du rapport de masses volumiques. Les paramètres α_h et α_l ne doivent pas dépasser 1, pour éviter d'obtenir une valeur de pression négative, et $\alpha_l \leq \alpha_h$ en général. Ils sont égaux si le rapport de masses volumiques est unitaire.

En adoptant un réseau de l'espace des phases discrétilisé *D2Q9*, les poids correspondants W_i sont donnés par l'équation 3.5, comme présenté dans le Chapitre 3.

De plus, la fonction de distribution totale (*color-blind*) est donnée par :

$$f_i(\vec{x}, t) = f_i^h(\vec{x}, t) + f_i^l(\vec{x}, t). \quad (4.7)$$

soit la somme de celle de la phase à haute masse volumique $f_i^h(\vec{x}, t)$ et à faible masse volumique $f_i^l(\vec{x}, t)$ à chaque noeud. La vitesse de cette population totale est \vec{c}_i de part l'équation 3.1. Leclaire *et al.* [41] ont suggéré d'ajouter un nouveau terme Φ_i^k , de sorte que la fonction de distribution d'équilibre améliorée pour chaque phase devienne :

$$f_i^{k(e)} = \rho_k \left(\chi_i^k + W_i \left[\frac{3}{c^2} \vec{c}_i \cdot \vec{u} + \frac{9}{2c^4} (\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2c^2} (\vec{u} \cdot \vec{u}) \right] \right) + \Phi_i^k \quad (4.8)$$

La raison principale de l'ajout du terme Φ_i^k est d'atténuer le problème de discontinuité [41] qui se manifeste dans certains scénarios où le contraste de masse volumique est différent de l'unité, et surtout d'améliorer l'invariance galiléenne dans ces cas. Il peut être calculé à l'aide des expressions suivantes :

$$\Phi_i^k = \begin{cases} \frac{-3\bar{v}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \rho_k)}{c^2}, & i = 0 \\ \frac{4\bar{v}(\mathbf{G}_k : \vec{c}_i \otimes \vec{c}_i)}{c^4}, & i = 1, 3, 5, 7 \\ \frac{\bar{v}(\mathbf{G}_k : \vec{c}_i \otimes \vec{c}_i)}{c^4}, & i = 2, 4, 6, 8 \end{cases} \quad (4.9)$$

La quantité \bar{v} est la viscosité cinématique moyennée avec les viscosités cinématiques des deux phases par leurs masses volumiques respectives. Elle est généralement calculée par une moyenne harmonique :

$$\bar{v} = \frac{\rho_h + \rho_l}{\frac{\rho_h}{\nu_h^0} + \frac{\rho_l}{\nu_l^0}} \quad (4.10)$$

Il convient de noter que l'équation 4.9 utilise le produit tensoriel et la contraction tensorielle, identifiés par « \otimes » et « $:$ » respectivement. En outre, le tenseur \mathbf{G}_k s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{G}_k = \frac{1}{8} [(\vec{u} \otimes \vec{\nabla} \rho_k) + (\vec{u} \otimes \vec{\nabla} \rho_k)^T] \quad (4.11)$$

Lorsque la fonction de distribution d'équilibre est évaluée, le terme restant de l'équation 4.2 est le facteur de relaxation, qui peut être égal au facteur de relaxation effectif suivant pour

chacune des phases :

$$\omega_k|_{k=h,l} = \omega_{\text{eff}} = \frac{2c^2\Delta t}{6\bar{v} + c^2\Delta t} = \frac{2}{6\bar{v} + 1} \quad (4.12)$$

De plus, similairement au cas simple phase, la masse volumique de chacun des phases ρ_k , la masse volumique macroscopique sans couleur ρ et la quantité de mouvement par unité de volume $\rho\vec{u}$ peuvent être déduites par :

$$\rho_k = \sum_i f_i^k = \sum_i f_i^{k(e)} \quad (4.13)$$

$$\rho = \sum_k \rho_k \quad (4.14)$$

$$\rho\vec{u} = \sum_k \sum_i f_i^k \vec{c}_i = \sum_k \sum_i f_i^{k(e)} \vec{c}_i \quad (4.15)$$

Comme le montre l'équation 4.15, la vitesse macroscopique $\vec{u} = \frac{\rho\vec{u}}{\rho}$ est évaluée par le biais de la quantité de mouvement par unité de volume $\rho\vec{u}$. Par ailleurs, en présence d'un champ externe, la quantité de mouvement doit être ajustée en conséquence, ce qui donne :

$$\rho\vec{u} = \sum_k \sum_i f_i^k \vec{c}_i + \frac{\Delta t}{w_{\text{eff}}} \vec{F}_b = \sum_k \sum_i f_i^{k(e)} \vec{c}_i + \frac{\Delta t}{w_{\text{eff}}} \vec{F}_b \quad (4.16)$$

La force de volume \vec{F}_b (*body force*) permet de modéliser un champ externe. Pour les simulations mettant en jeu une force externe, elle sera définie explicitement plus tard. De plus, sans forces externes, il faut préciser que ce modèle est capable de respecter la conservation de la masse, soit du champ ρ_k , et de la quantité de mouvement, c'est-à-dire du champ $\rho\vec{u}$.

Les masses volumiques macroscopiques de chaque fluide peuvent être utilisées pour calculer le champ de couleur (*color field*) φ_I pour le modèle **CGM I** :

$$\varphi_I = \frac{\rho_h - \rho_l}{\rho_h + \rho_l} \quad (4.17)$$

Les valeurs du champ de couleur sont comprises entre -1 et 1 et sont utiles pour le post-traitement, i.e -1 pour une occupation totale du fluide l et 1 pour une occupation totale du fluide h .

4.1.2 Étape de perturbation

Après avoir appliqué la collision monophasique, la perturbation est appliquée. Le terme de forçage associé permet de modéliser la tension interfaciale. Le terme F_i^k de l'équation 4.1

pour le fluide k est évalué en calculant les variables par rapport à l'équation suivante :

$$F_i^k(\vec{x}, t) = \frac{A}{2} |\vec{C}| \left[W_i \frac{(\vec{C} \cdot \vec{c}_i)^2}{|\vec{C}|^2 c^2} - B_i \right] \quad (4.18)$$

Le paramètre A est utilisé pour estimer la valeur de la tension interfaciale par :

$$\sigma = \frac{1}{9} \frac{2A}{\omega_{\text{eff}}} c^2 \Delta t \quad (4.19)$$

Par conséquent, la tension interfaciale peut être directement injectée dans l'équation 4.18. Par ailleurs, le gradient de couleur \vec{C} est utilisé pour approximer le vecteur normal $\vec{n} = \frac{\vec{C}}{|\vec{C}|}$ à l'interface entre chacun des deux fluides. Dans le cas de deux phases, il est défini comme suit :

$$\vec{C} = \frac{\rho_l}{\rho} \vec{\nabla} \left(\frac{\rho_h}{\rho} \right) - \frac{\rho_h}{\rho} \vec{\nabla} \left(\frac{\rho_l}{\rho} \right) \quad (4.20)$$

L'expression de l'équation 4.20 est pratique pour les simulations d'écoulements à deux phases, où une seule interface est considérée. Enfin, les poids B_i dépendent de la discrétisation de l'espace des phases. Ils sont donnés pour $D2Q9$ par :

$$B_i = \begin{cases} \frac{-4}{27} & , \quad i = 0 \\ \frac{2}{27} & , \quad i = 1, 3, 5, 7 \\ \frac{5}{108} & , \quad i = 2, 4, 6, 8 \end{cases} \quad (4.21)$$

Ces poids permettent d'évaluer adéquatement les valeurs de la tension interfaciale. Avec cette dernière et l'utilisation de l'expression 4.18, la compatibilité avec le tenseur capillaire dans les équations macroscopiques du continuum est assurée [73]. Lors du calcul du gradient de couleur \vec{C} , il convient de mentionner que les opérateurs de gradient discret isotrope peuvent être utilisés pour la discrétisation des gradients, comme dans l'équation 4.20 [35]. Cela permet d'améliorer la précision du modèle CGM. Pour une quantité ζ , le calcul du gradient est évalué par :

$$\vec{\nabla} \zeta = \frac{1}{\Delta x} \sum_i (3W_i) \zeta(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t) \frac{\vec{c}_i}{c} \quad (4.22)$$

Dans le cas du **CGM I**, $\zeta \equiv \frac{\rho_h}{\rho}$ ou $\zeta \equiv \frac{\rho_l}{\rho}$. Il est à noter que cet opérateur est non local.

Ainsi, ayant pris en compte l'opérateur de collision, la perturbation peut être appliquée et les PDFs sont mis à jour :

$$f_i^k(\vec{x}, t^*) = f_i^k(\vec{x}, t) + \Omega_i^k + F_i^k(\vec{x}, t) \quad (4.23)$$

4.1.3 Étape de recoloration

L'opérateur de recoloration assure la minimisation du mélange entre les fluides. Le modèle utilisé a été initialement développé par Latva-Kokko et Rothman [48] pour des rapports de masses volumiques unitaires. La distribution des populations post-recoloration $f_i^k(\vec{x}, t^{**})$ peut être calculée pour des rapports de masses volumiques non unitaires comme suit [34] :

$$f_i^h(\vec{x}, t^{**}) = \frac{\rho_h}{\rho} f_i + \beta \frac{\rho_h \rho_l}{\rho^2} \cos(\Theta_i) \sum_k f_i^{k(e)}(\vec{x}, t^*, \rho_k, \vec{u} = 0, \alpha_k) \quad (4.24)$$

$$f_i^l(\vec{x}, t^{**}) = \frac{\rho_l}{\rho} f_i + \beta \frac{\rho_h \rho_l}{\rho^2} \cos(\Theta_i) \sum_k f_i^{k(e)}(\vec{x}, t^*, \rho_k, \vec{u} = 0, \alpha_k) \quad (4.25)$$

L'angle Θ_i représente l'angle entre le gradient de couleur \vec{C} et la vitesse \vec{c}_i dans la même direction. Pour ajuster l'épaisseur de l'interface, un paramètre libre β est employé dans les équations 4.24 et 4.25. Il définit la tendance des deux fluides à se séparer. Plus sa valeur est élevée, plus l'interface est mince. Pour éviter d'obtenir des fonctions de distributions négatives, la valeur de β doit être bornée entre 0 et 1. Sinon, la stabilité du modèle est compromise.

Dans les situations où des rapports élevés de masses volumiques sont simulés, un saut numérique de la masse volumique apparaît entre les deux phases lors de l'initialisation. Une technique spécifique d'initialisation à différentes phases est proposée dans [37]. Par ailleurs, Leclaire *et al.* [38] ont proposé d'adopter une technique de lissage (*smoothing*) de la solution initiale, avant de commencer la simulation (c'est-à-dire à un moment négatif $t < 0$ d'un point de vue algorithmique). Pendant le lissage, les forces appliquées sont négligées et la vitesse macroscopique est fixée à 0 à ce temps. Le paramètre β devient :

$$\beta = \begin{cases} \frac{t}{t_{\text{smooth}}} - \left(\frac{t}{t_{\text{smooth}}} - 1 \right) \beta^* \left(\frac{\Delta x}{\Delta x^*} \right)^\eta, & t < 0 \\ \beta^* \left(\frac{\Delta x}{\Delta x^*} \right)^\eta, & t \geq 0 \end{cases} \quad (4.26)$$

où t_{smooth} est la durée d'exécution de cette technique, généralement comprise entre 2000 et 10000. La variable η est destinée au raffinement de l'interface et prend généralement des valeurs comprises entre $\frac{1}{2}$ et $\frac{3}{4}$. L'indice “*” fait référence aux variables pour un maillage grossier. Les variables d'espacement Δx et Δx^* se réfèrent à des pas d'espace dans l'espace physique, et non en unités LBM. Cela permet de réduire considérablement les instabilités dues à la discontinuité d'une condition initiale non lissée, et d'obtenir une interface lisse et fine, où la norme du gradient de couleur devrait être élevée.

4.1.4 Étape de propagation

La dernière étape pour compléter un pas de temps est celle de la propagation. Comme le cas de la LBM classique pour les écoulements monophasiques, chaque fonction de distribution sera envoyée aux cellules voisines le long des neuf directions de l'espace des phases prescrites afin d'être utilisée pour le pas de temps suivant. La seule différence est que la propagation sera appliquée à chacun des fluides à haute et faible masse volumique. Mathématiquement, elle s'exprime comme suit :

$$f_i^k(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^k(\vec{x}, t^{**}) \quad (4.27)$$

4.2 Modèle de Subhedar : CGM II

Le deuxième modèle examiné est le modèle Subhedar [42]. Il s'agit également d'une méthode d'interface diffuse. Subhedar utilise une fonction de distribution d'équilibre basée sur la vitesse, qui a d'abord été conçue pour la famille des champs de phase par Zu et He [43]. Deux phases fluides sont de nouveau considérées, et les expressions correspondantes pour le présent modèle sont présentées. Le fluide sans couleur est aussi simplement la population totale du fluide, comme dans l'équation 4.7. L'équation de Boltzmann sur réseau représentant la dynamique de ces populations est donnée par l'équation 4.1 du **CGM I** également.

Si le type d'opérateur de collision BGK Ω_i à temps de relaxation simple est adopté, celui-ci peut être exprimé comme suit :

$$\Omega_i = \frac{1}{\tau} (f_i^{(e)} - f_i) \quad (4.28)$$

Il s'agit aussi d'un type de relaxation SRT. Le terme de forçage F_i de l'équation 4.1 est plus complexe, mais plus générale que pour le **CGM I**. L'équation 4.28 prend en compte la population d'équilibre totale $f_i^{(e)}$. Cette dernière dépend de la direction et s'écrit :

$$f_i^{(e)} = \begin{cases} \chi_i - (1 - W_i) \frac{p}{c_s^2} - W_i \frac{\vec{u} \cdot \vec{u}}{2c_s^2}, & i = 0 \\ \chi_i + W_i \left[\frac{p}{c_s^2} + \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{u}}{c_s^2} + \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\vec{u} \cdot \vec{u}}{2c_s^2} \right], & i \neq 0 \end{cases} \quad (4.29)$$

La variable $c_s = c/\sqrt{3}$ est la vitesse du son du réseau *D2Q9*. Il est à remarquer que celle-ci est constante et identique dans les deux phases, contrairement au modèle **CGM I**, dans lequel la vitesse du son dans chaque phase est différente. La vitesse du fluide est \vec{u} . Le terme p est la pression auxiliaire. C'est aussi le rapport entre la pression hydrodynamique p_{hy} et la masse

volumique du fluide ρ : $p = p_{hy}/\rho$. Les poids W_i employés sont ceux définis pour le **CGM I**, comme spécifié par l'équation 3.5.

Les fonctions de distribution d'équilibre correspondantes avec couleur $f_i^{h(e)}$ et $f_i^{l(e)}$ sont obtenues de la distribution d'équilibre sans couleur tel que :

$$f_i^{h(e)} = \varphi_{II} f_i^{(e)} \quad (4.30)$$

$$f_i^{l(e)} = (1 - \varphi_{II}) f_i^{(e)} \quad (4.31)$$

où φ_{II} est le champ de couleur du modèle **CGM II**. Alors que la plage de valeurs dans le premier modèle CGM est définie comme $\varphi_I \in [-1, 1]$ par le calcul de l'équation 4.17, elle se situe ici dans : $\varphi_{II} \in [0, 1]$ pour le modèle **CGM II**. Une valeur de 1 indique une occupation entière du fluide avec la masse volumique la plus élevée (fluide h). Le champ de couleur φ_{II} est calculé comme :

$$\varphi_{II} = \sum_i f_i^h \quad (4.32)$$

Pour éviter d'obtenir une valeur négative du champ de couleur ou une valeur supérieure à 1, les limiteurs *min* et *max* sont appliqués au calcul du champ de couleur :

$$\varphi_{II} = \min \left(1, \max \left(0, \sum_i f_i^h \right) \right) \quad (4.33)$$

Cela améliore considérablement la stabilité du modèle, mais peut compromettre le principe de conservation de la masse. Avec ce champ issu de l'équation 4.33 et une interpolation pondérée, il est possible de calculer la viscosité moyenne harmonique :

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\frac{\varphi_{II}}{\nu_h^0} + \frac{1-\varphi_{II}}{\nu_l^0}} \quad (4.34)$$

Le temps de relaxation τ est alors évalué par $\tau = \frac{1}{2} + \frac{\bar{\nu}}{\Delta t c_s^2}$. Les viscosités cinématiques ν_h^0 et ν_l^0 sont ici les viscosités constantes des deux fluides.

D'autre part, la masse volumique ρ est déduite directement du champ de couleur :

$$\rho = \varphi_{II} \rho_h^0 + (1 - \varphi_{II}) \rho_l^0 \quad (4.35)$$

La masse volumique dépend des propriétés physiques initiales également, soit les masses volumiques ρ_h^0 et ρ_l^0 .

La variable χ_i est donnée par :

$$\chi_i = \begin{cases} \alpha, & i = 0 \\ \frac{1-\alpha}{5}, & i = 1, 3, 5, 7 \\ \frac{1-\alpha}{20}, & i = 2, 4, 6, 8 \end{cases} \quad (4.36)$$

Cette variable est similaire à celle utilisée dans le modèle **CGM I** à une différence près. Le paramètre libre α est aussi une constante positive : $0 \leq \alpha \leq 1$. Ce paramètre dépend d'une quantité $M = \frac{3}{10}(1 - \alpha)$, utilisée pour déterminer la mobilité de l'interface. Subhedar [42] montre qu'elle doit avoir une petite valeur, pour éviter un mouvement sous l'effet de forces artificielles. Il est recommandé de la maintenir constante pendant les simulations, ce qui est adéquat dans le cas de fluides incompressibles. Fixer la valeur de M permet de définir la valeur de α , et donc la valeur de χ_i dans chacune des 9 directions. La façon dont la mobilité de l'interface est traitée ici implique de garder la même vitesse du son pour tous les fluides, alors que la variable α_k dans le modèle **CGM I** a une valeur spécifique pour chaque fluide k .

Après avoir évalué la fonction de distribution d'équilibre, le terme de forçage F_i à l'échelle des distributions doit être calculé. L'expression utilisée est :

$$F_i = W_i \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \frac{\vec{F}' \cdot \vec{c}_i}{\rho c_s^2} \quad (4.37)$$

Le terme de forçage dans l'équation 4.37 prend en compte la force totale qui est appliquée au fluide. La force totale \vec{F}' est donnée par :

$$\vec{F}' = \vec{F}_{visc} + \vec{F}_s + \vec{F}_p + \vec{F}_b \quad (4.38)$$

Les forces physiques sont la force de tension interfaciale \vec{F}_s et la force de volume (*body force*) \vec{F}_b . La force de volume dépendra du problème à résoudre et sera définie explicitement lors des simulations mettant en jeu au moins une force externe. Les forces de correction sont la force visqueuse \vec{F}_{visc} , et la force de pression \vec{F}_p . Cette dernière peut être calculée par :

$$\vec{F}_p = -p \vec{\nabla} \rho \quad (4.39)$$

Pour le calcul de la force visqueuse \vec{F}_{visc} , une définition fournie dans [74] est :

$$\vec{F}_{visc} = \bar{\nu} \left[(\vec{\nabla} u + \vec{\nabla} u^T) \cdot (\vec{\nabla} \rho) \right] \quad (4.40)$$

Il est à rappeler que la variable $\bar{\nu} = c_s^2 \Delta t \left(\tau - \frac{1}{2} \right)$ est liée à la viscosité cinématique. Le terme de force est l'analogue de l'équation 4.9 du **CGM I**. Le terme $(\vec{\nabla} u + \vec{\nabla} u^T)$ ne peut être déduit facilement localement à un pas de temps donné. Une possibilité est de le calculer avec les distributions f_i et $f_i^{(e)}$ du réseau, sans les noeuds voisins. Ainsi, le tenseur de taux de cisaillements $\mathbb{S} = \frac{1}{2}(\vec{\nabla} u + \vec{\nabla} u^T)$ est converti en un deuxième tenseur mettant en jeu les vitesses \vec{c}_i du réseau. La relation entre le tenseur \mathbb{S} et ce deuxième tenseur met en évidence un coefficient multiplicatif $-2c_s^2 \tau \rho$ [75]. Il est à noter que ρ est généralement dans ce coefficient lorsque le moment 0 des distributions représente la masse volumique. Ici, le moment 0 représente le champ de couleur, qui est une normalisation de la masse volumique. Pour le gradient de masse volumique, il est calculé à travers le gradient du champ de couleur, en exploitant l'équation 4.35. Ainsi :

$$\vec{\nabla} \rho = (\rho_h^0 - \rho_l^0) \vec{\nabla} \varphi_{II} \quad (4.41)$$

De ces faits, la force visqueuse, appliquée à la population du non-équilibre, devient finalement :

$$\vec{F}_{visc} = -\frac{\bar{\nu}}{\tau c_s^2 \Delta t} \left[\left(\sum_i (\vec{c}_i)_x \otimes (\vec{c}_i)_y \right) (f_i - f_i^{(e)}) \right] \cdot (\vec{\nabla} \varphi_{II}) (\rho_h^0 - \rho_l^0) \quad (4.42)$$

Le coefficient multiplicatif $-\frac{\bar{\nu}}{\tau c_s^2}$ est le terme à appliquer pour assurer la cohérence entre le tenseur d'ordre 2 de non équilibre (moment 2) et l'approximation de la force visqueuse. La masse volumique n'est pas présente puisque les PDFs dans **CGM II** représente le champ de couleur et non la masse volumique. La force de correction de la viscosité permet de capturer la discontinuité à l'interface si des rapports de masses volumiques non unitaires sont simulés.

Dans ce modèle, les termes de pression et de vitesse sont implicitement dépendants :

$$\vec{u} = \sum_i f_i \vec{c}_i + \frac{\vec{F}_b + \vec{F}_{visc} + \vec{F}_s}{2\rho} \Delta t - \frac{p \vec{\nabla} \rho}{2\rho} \Delta t \quad (4.43)$$

$$p = \frac{1}{1 - W_0} \left[-\frac{W_0}{2} (\vec{u} \cdot \vec{u}) - (1 - \chi_0) c_s^2 + \sum_{i \neq 0} f_i c_i^2 \right] \quad (4.44)$$

Des itérations de type point-fixe sont appliquées. Subhedar déclare que la différence de valeur de la pression entre deux pas de temps est faible. De ce fait, la valeur de pression à un pas de temps précédent est une estimation initiale adéquate. La vitesse est calculée à l'aide de la formule 4.43. La valeur résultante est ensuite utilisée dans l'équation 4.44. Pour le cas de ce travail, des itérations par pas de temps sont effectuées, jusqu'à atteindre un nombre maximal d'itérations prédéfini ou des valeurs jugées invariantes. Différentes stratégies seront présentées au moment opportun.

4.2.1 Étape de perturbation

Comme de nombreux modèles CGM, l'étape de perturbation est adoptée afin de prendre en compte la tension interfaciale et ses effets. L'expression de la courbure de l'interface permet de modéliser la discontinuité à l'interface au moyen d'une équation différentielle du second ordre. La courbure de l'interface est calculé avec des termes de variables actives uniquement à son emplacement, par exemple le Laplacien du champ de couleur. Après un développement mathématique rigoureux (section II.A dans [42]), la force de tension interfaciale devient :

$$\vec{F}_s = \sigma \left[\frac{48}{T} \varphi_{\text{II}} (1 - \varphi_{\text{II}}) \left(\frac{1}{2} - \varphi_{\text{II}} \right) - \frac{3T}{2} \nabla^2 \varphi_{\text{II}} \right] \vec{\nabla} \varphi_{\text{II}} \quad (4.45)$$

Pour rappel, la tension interfaciale est σ . L'épaisseur de l'interface est T (*thickness*). Elle peut également être considérée comme l'échelle de longueur de la séparation des phases. Elle est inversement proportionnelle au paramètre constructeur β dans le premier modèle **CGM I** [76]. Dans cette même référence, la largeur T a été choisie pour être égale à $T = \frac{2}{\beta}$. Comme le montre l'équation 4.45, il est nécessaire de définir le gradient du champ de couleur $\vec{\nabla} \varphi_{\text{II}}$ et son Laplacien $\nabla^2 \varphi_{\text{II}}$. Pour le gradient, une formule identique à l'équation 4.22 est adoptée ($\zeta \equiv \varphi_{\text{II}}$). La formule suivante pour le Laplacien d'une quantité $\zeta \equiv \varphi_{\text{II}}$ est utilisée :

$$\nabla^2 \zeta = \frac{1}{\Delta x^2} \sum_i (6W_i) [\zeta(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t) - \zeta(\vec{x})] \quad (4.46)$$

Ces expressions permettent d'approximer les différentiations numériquement. La fonction de distribution issue de la collision et la perturbation $f_i(\vec{x}, t^*)$ est alors mise à jour :

$$f_i(\vec{x}, t^*) = \left(1 - \frac{1}{\tau} \right) f_i(\vec{x}, t) + \frac{1}{\tau} f_i^{(e)}(\vec{x}, t) + F_i(\vec{x}, t) \Delta t \quad (4.47)$$

4.2.2 Étape de ségrégation

Le but de cette étape supplémentaire est d'assurer la préservation de la distinction des deux phases. En d'autres termes, les populations de fluides f_i^h et f_i^l près de l'interface sont redistribuées. Cette étape est nécessaire pour le suivi de l'interface. Une version modifiée d'autres modèles CGM est utilisée. Mathématiquement, les populations post-ségrégation $f_i^h(\vec{x}, t^{**})$ et $f_i^l(\vec{x}, t^{**})$ sont données par :

$$f_i^h(\vec{x}, t^{**}) = \varphi_{\text{II}} f_i(\vec{x}, t^*) + 2 \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{n}}{T} \varphi_{\text{II}} (1 - \varphi_{\text{II}}) f_i^{(e)}(\vec{x}, t^*, \vec{u} = 0) \quad (4.48)$$

$$f_i^l(\vec{x}, t^{**}) = (1 - \varphi_{\text{II}}) f_i(\vec{x}, t^*) - 2 \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{n}}{T} \varphi_{\text{II}} (1 - \varphi_{\text{II}}) f_i^{(e)}(\vec{x}, t^*, \vec{u} = 0) \quad (4.49)$$

Comme montré, la fonction de distribution d'équilibre $f_i^{(e)}$ dans les équations 4.48 et 4.49 est calculée avec une vitesse macroscopique nulle. Le vecteur \vec{n} est le vecteur normal unitaire à l'interface, dans une direction perpendiculaire. Il peut être calculé en utilisant le gradient normalisé du champ de couleur $\vec{n} = \frac{\vec{\nabla}\varphi_{II}}{|\vec{\nabla}\varphi_{II}|}$. Si ce gradient est exactement zéro, la norme au dénominateur est remplacée par ϵ , soit la valeur zéro machine, et ce, afin d'éviter une division par 0. Ces deux équations assurent, théoriquement, la conservation de la couleur, à travers la conservation de la population totale du fluide et de la population individuelle du fluide après la ségrégation.

Lissage initial Par ailleurs, similairement au modèle **CGM I**, la technique de lissage est adoptée, ce qui permet d'obtenir une solution initiale lisse également. La même équation que l'équation 4.26 est utilisée, à la seule différence de l'emploi de l'épaisseur de l'interface T au lieu du reconstructeur β . Cette approche permet en plus d'ajuster cette épaisseur pour les deux modèles CGM, relativement à un maillage grossier de référence.

4.2.3 Étape de propagation

Ensuite, l'étape de propagation est appliquée sur la population sans couleur et de la phase h :

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t^{**}) \quad (4.50)$$

$$f_i^h(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^h(\vec{x}, t^{**}) \quad (4.51)$$

Les valeurs des fonctions de distribution f_i^h mises à jour seront utilisées pour calculer le champ de couleur au pas de temps subséquent, selon l'équation 4.33. Il convient de noter que le processus de collision-propagation dans le modèle de Subhedar ne prend pas en compte les informations relatives à la masse volumique (ou à la masse). La principale quantité d'intérêt est le champ de couleur. En d'autres termes, le moment 0 de la population sans couleur devient : $\sum_i f_i = 1$, et non $\sum_i f_i = \rho$, comme c'est le cas pour le modèle **CGM I**. Cette différence résulte simplement de la façon dont les deux modèles sont construits. Le champ de couleur est indépendant de la masse volumique des fluides dans le modèle **CGM II**. C'est la masse volumique qui est dérivée du champ de couleur calculé. Dans les deux cas, le champ de couleur (et la masse indirectement) est théoriquement conservé, principalement en raison du processus de recoloration adéquat.

Pour démarrer la résolution algorithmique, la fonction de distribution f_i est initialisée avant le premier pas de temps avec la fonction de distribution d'équilibre à vitesse macroscopique nulle, en exploitant l'équation 4.29. Le champ de couleur initial est issu de la solution initiale.

Par la suite, la fonction de distribution f_i^h est calculée par le biais de l'équation 4.30. Les variables macroscopiques, ρ et $\bar{\nu}$, sont alors déduits, avant de poursuivre avec les étapes de collision, perturbation et ségrégation pour chaque pas de temps. Les valeurs du champ de pression sont posées nulles initialement, comme dans [42].

Récapitulatif CGM Deux diagrammes décrivant schématiquement les modèles **CGM I** et **CGM II** sont présentés dans l'annexe B.

4.3 Cas tests de comparaisons et vérifications

Après avoir présenté les modèles de Leclaire *et al.* [36] et de Subhedar [42], trois cas tests sont étudiés dans cette section : gouttelette stationnaire, écoulement de Poiseuille à deux couches, et l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Les deux premières applications sont considérées comme des cas stationnaires, contrairement au dernier cas test, où le temps a une influence significative sur le comportement de la solution et où les phénomènes physiques sont plus complexes. Le but est d'effectuer une vérification avec des solutions analytiques et avec des solutions code-à-code, entre **CGM I** et **CGM II**. La comparaison des performances en termes de stabilité et exactitude des résultats entre les deux modèles sera également traitée.

Les simulations numériques présentées dans cette section ont été initialement élaborées algorithmiquement par Vanderbecken [77] avant d'appliquer quelques modifications lorsque nécessaire, et les résultats ont également été comparés aux conclusions de son travail. Toute la section sur le **CGM I** est originale et programmée par l'auteur de ce mémoire. Pour rappel, le réseau *D2Q9* est utilisé. De plus, le temps de relaxation utilisé est de type SRT, comme dans l'équation 4.2 et 4.47. Les principales différences entre les cas tests sont la solution initiale, les conditions aux limites et les valeurs des différentes propriétés des phases.

Pour garantir l'atteinte de l'état stationnaire pour certains cas tests, les différences selon des normes $\|\cdot\|_p$ de différents degrés p ou infinis $\|\cdot\|_\infty$ seront évaluées avec une tolérance ϵ . Les formulations sont données par :

$$\|\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n\|_p = \left(\sum_{j=0}^{N-1} |\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n|^p \Delta x \right)^{\frac{1}{p}} = \epsilon_p \quad (4.52)$$

$$\|\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n\|_\infty = \max_j |\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n| = \epsilon_\infty \quad (4.53)$$

Ces expressions sont valides entre deux pas de temps successifs $n + 1$ et n , pour une quantité ζ de vérification de la convergence, avec différents nœuds j , et un nombre total de N de nœuds. Pour les deux cas tests stationnaires, le régime permanent est considéré atteint

lorsque : $\epsilon_\infty \leq 10^{-10}$ et $\zeta \equiv f_i$. Ce critère est testé sur la population de distribution totale. Malgré que ce choix soit contraignant, il permet d'atteindre strictement le régime stationnaire.

Pour accélérer les calculs, en particulier pour des maillages fins, une carte graphique est utilisée, i.e. *AMD Vega GPU 16 GB memory*.

Une remarque jugée importante à indiquer est que dans la mesure du possible, il est recommandé d'employer les valeurs ν entre 1/100 et 1/6 pour minimiser les risques d'instabilités numériques.

Enfin, dans le cas des simulations de cette section, le critère de convergence des itérations de type point-fixe pour le **CGM II** appliquées à chacun des champs de vitesse \vec{u} et de pression p des deux équations 4.43 et 4.44 est : $\epsilon_\infty \leq 10^{-10}$, avec $\zeta \equiv \vec{u}$ et $\zeta \equiv p$ respectivement. Un nombre total maximal de 100 est posé.

4.3.1 Gouttelette stationnaire : loi de Laplace

Dans le cas test d'une gouttelette stationnaire, une gouttelette de fluide de masse volumique ρ_h est placée au centre du système. Un second fluide de masse volumique inférieure ρ_l entoure la gouttelette. Ce cas test permet d'investiguer l'exactitude numérique de la capture des forces capillaires, ainsi que la magnitude des courants parasites émergents au régime stationnaire. Cette application permet également de vérifier la stabilité et l'équilibre de l'interface. Le domaine avec la solution initiale est présenté dans la Figure 4.1.

Dans la Figure 4.1 fournie, la plage de valeurs du champ de couleur φ est comprise entre 0 et 1. La valeur de 1 correspond à une occupation complète du fluide rouge. En son absence totale, la valeur est de 0. Le champ de couleur φ dépend du rayon et est donné par [42] :

$$\varphi_{\text{II}} = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left[\frac{2(r - R_0)}{T} \right] \right] \quad (4.54)$$

Le rayon r est la variable qui dépend de la position par rapport au centre de la gouttelette. Pour le modèle **CGM I**, la même formule 4.54 est utilisée pour initialiser le champ de couleur, puis celui de la masse volumique, avant d'en déduire les PDFs initiaux :

$$\rho_h = \varphi_{\text{II}} \rho_h^0 \implies f_i^{h(e)} = \varphi_{\text{II}} \rho_h^0 \chi_i^h \equiv f_i^h(\vec{x}, t = 0) \quad (4.55)$$

$$\rho_l = (1 - \varphi_{\text{II}}) \rho_l^0 \implies f_i^{l(e)} = (1 - \varphi_{\text{II}}) \rho_l^0 \chi_i^l \equiv f_i^l(\vec{x}, t = 0) \quad (4.56)$$

L'épaisseur de l'interface ne doit pas être grande dans le modèle CGM. Une valeur de $T = 5$

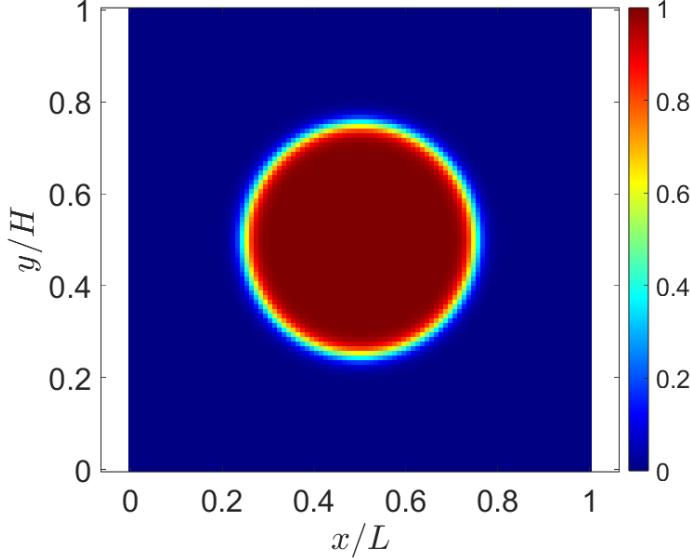


FIGURE 4.1 Solution initiale du champs de couleur (exemple avec φ_{II}) avec une gouttelette de rayon $\frac{R_0}{L} = 0.25$ dans un domaine carré, avec $nx = ny = 100$, où nx et ny sont les nombres de noeuds choisis dans la direction x et y respectivement. Les dimensions L et H sont respectivement la longueur et la hauteur du domaine. Des conditions périodiques sont appliquées à toutes les frontières, avec une vitesse du fluide nulle. Le fluide à haute masse volumique est illustré en rouge, le fluide à faible masse volumique en bleu

est considérée dans cet exemple. En raison des forces dissipatives visqueuses qui se manifestent, la différence de pression hydrodynamique p_{hy} au centre doit obéir à la loi de Laplace :

$$\Delta p_{hy} = \frac{\sigma}{R} \quad (4.57)$$

La tension interfaciale σ et le rayon R sont imposés. La chute de pression Δp_{hy} peut également être interprétée comme la différence de pression entre le fluide intérieur et le fluide extérieur de la gouttelette. La discontinuité de la pression est causée par la présence de la tension interfaciale. Ainsi, l'expression de l'équation 4.5 est utilisée pour évaluer la différence de pression pour le modèle **CGM I** (e.g. $\varphi_I > 0.999998$ pour la phase h), tandis que les valeurs du champ de pression à différentes régions sont extraites au cours de la résolution de l'équation 4.44 pour le modèle **CGM II**. Ceci est à cause que la pression hydrodynamique est mal définie à l'interface, mais peut être bien calculée à l'intérieur d'un fluide pour le **CGM I**. L'emplacement de l'interface est défini par les valeurs suivantes : $\varphi_I = 0$ et $\varphi_{\text{II}} = 0.5$.

Connaissant la solution analytique grâce à la relation 4.57, il est suggéré de la comparer aux résultats numériques, tels que présentés dans la Figure 4.2.

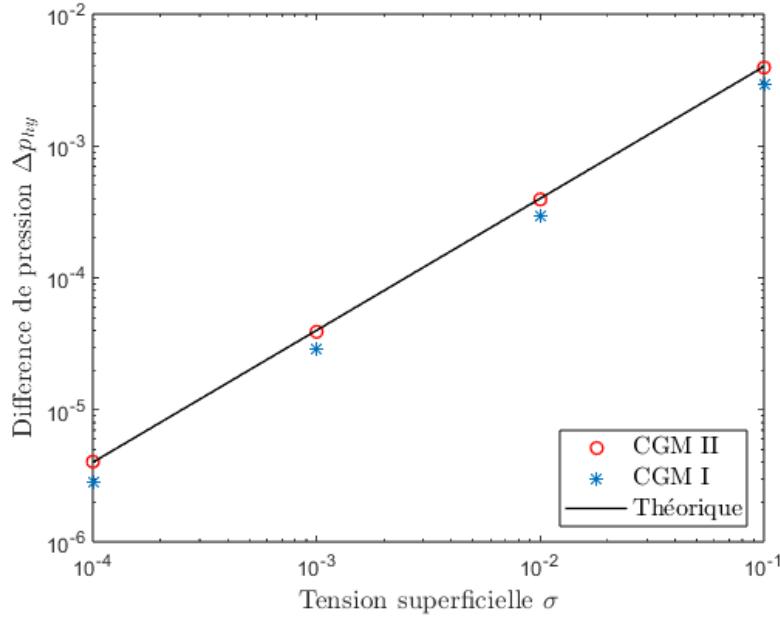


FIGURE 4.2 Comparaison des résultats analytiques et numériques pour la différence de pression. Le rapport de masses volumiques est $\frac{\rho_h}{\rho_l} = 1000$. Le rapport de viscosités cinématiques $\frac{\nu_h}{\nu_l}$ est maintenu constant et égal à 1

La Figure 4.2 montre que les valeurs numériques respectent la tendance linéaire des valeurs analytiques de la différence de pression, pour la plage de $[10^{-4}, 10^{-1}]$ de la tension interfaciale. Une valeur de tension interfaciale plus faible entraîne une différence de pression plus faible pour le même rayon. De plus, le modèle **CGM II** semble avoir des résultats plus précis que le modèle **CGM I**. Pour expliciter ce point par un exemple, pour un rapport de masses volumiques de 1000, la différence de pression analytique pour $\sigma = 0.01$ est de 4.000×10^{-4} . La simulation permet de conclure une valeur de 2.9307×10^{-4} pour le modèle **CGM I**, et de 4.0512×10^{-4} pour le modèle **CGM II**. Il est à noter que les valeurs de l'épaisseur d'interface choisies pour ce cas test correspondent à celles proposées par l'application numérique de Subhedar [42]. Le but est de comparer entre les deux modèles CGM avec la même valeur d'interface, mais il est à mentionner que les résultats de chacun peuvent être sensibles à la valeur de β ou T . Enfin, il est à rappeler que la pression est directement calculée dans le processus de collision dans le **CGM II**, tandis que pour le **CGM I**, la pression est conclue en post-traitement et dépend des paramètres α_k initialement choisis.

Cela montre que la tension interfaciale est mieux prise en compte avec le modèle **CGM II**. Subhedar a expliqué qu'une équation différentielle du second ordre de l'approximation de la valeur de courbure, mettant en évidence la variable de tension interfaciale dans de nombreux

modèles de champ de phase, facilite la récupération de la discontinuité de l'interface [42]. L'estimation de la courbure entre activement en jeu à l'interface et sa formulation aboutit à l'expression de la force de tension interfaciale présentée dans l'équation 4.45. La courbure n'est pas prise en compte dans le modèle **CGM I** et pourrait donc expliquer l'exactitude plus faible de celui-ci.

De plus, comme cela a été réalisé dans l'article de Subhedar [42], il est proposé de visualiser le profil du champ de couleur au centre le long de la position x , avec un intervalle de rapports de masses volumiques de $[1, 1000]$. La tension interfaciale est fixée à $\sigma = 0.01$. Les résultats sont présentés dans la Figure 4.3.

Les deux modèles ont des valeurs numériques qui répliquent le profil analytique prédit du champ de couleur, pour chaque rapport de masses volumiques étudié. Les résultats des deux modèles CGM sont adéquats. Les résultats ponctuels du modèle **CGM II** sont superposés au profil théorique aux endroits près de l'interface. Cela montre que la solution théorique (initiale) et la solution stationnaire coïncident, ce qui est d'autant plus facile à réaliser que le fluide sans couleur ($\rho_R + \rho_B$) est de nature incompressible [42]. Les deux modèles semblent donc être presque identiques en ce qui concerne l'évaluation du champ de couleur.

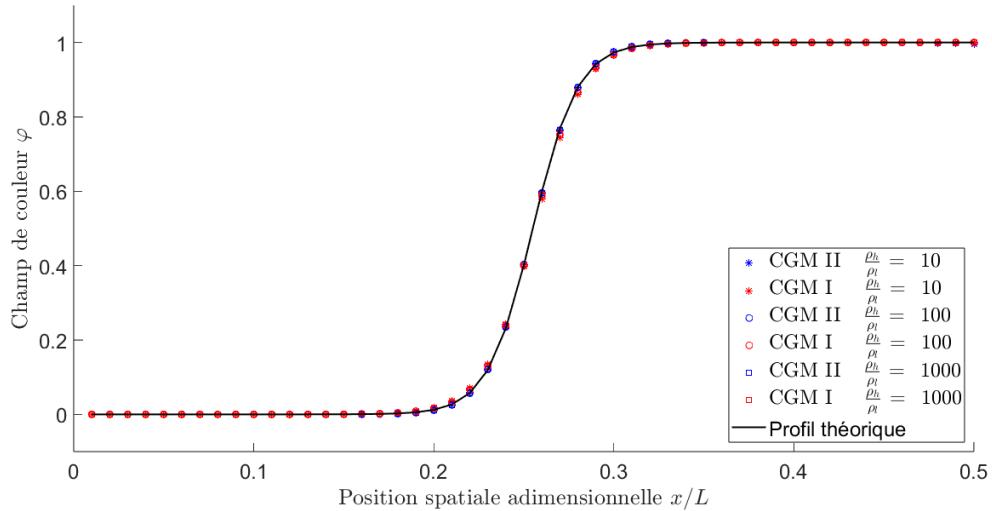


FIGURE 4.3 Différents profils du champ de couleur à l'état stationnaire à la position $y/H = 0.5$, avec différents rapports de masses volumiques. Le champs de couleur φ_I est normalisé entre 0 et 1. La tension interfaciale σ est de 0.01

Une dernière visualisation proposée dans ce cas test est l'illustration des courants parasites. Comme expliqué dans la revue de littérature, les forces de tension qui se produisent dans l'interface, comme dans l'exemple des gouttelettes stationnaires, provoquent un champ de vitesse non nul dans ces régions. Elles sont non physiques et doivent être minimisées. La

Figure 4.4 montre les courants parasites pour les deux modèles, en mettant en évidence le profil de l'interface.

Le modèle **CGM II** présente des valeurs maximales relativement plus faibles de la magnitude de la vitesse dans la région de l'interface. Pour le modèle **CGM I**, ces valeurs restent proches de l'interface mais légèrement plus éloignées que dans le second modèle **CGM II**. De plus, le modèle de **CGM II** affiche des valeurs globalement plus faibles que celui de **CGM I** : les courants parasites ont une magnitude plus faible en termes de vitesse, en particulier. Une symétrie octuple est observée, ce qui s'explique par la structure du réseau *D2Q9*. Cette différence de magnitude pour les courants parasites est aussi déduite de l'illustration du nombre de *Mach* pour les deux modèles CGM dans la Figure 4.4.

Par la suite, il est suggéré de finaliser l'étude par une analyse quantitative de l'erreur relative sur la pression, la magnitude des courants parasites, et le nombre de *Mach*. L'erreur relative sur la pression, Δp_h^E , est calculée comme suit :

$$\Delta p_{hy}^E (\%) = \left| \frac{\Delta p_t - \Delta p_s}{\Delta p_t} \right| \quad (4.58)$$

où Δp_t est la valeur théorique (*theoretical*) de la différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur de l'interface, et Δp_s (*simulation*) est la valeur numérique correspondante obtenue après simulation. Les résultats sont présentés dans le Tableau 4.1.

TABLEAU 4.1 Différentes valeurs de pression relative, des magnitudes des vitesses du champ et du nombre de *Mach* en fonction du rapport des masses volumiques. Deux valeurs de la mobilité d'interface M sont étudiées pour le modèle **CGM II**, soit 0.01 et 0.26. La tension interfaciale est de 0.01

λ	Modèle CGM II				Modèle CGM I						
	$M = 0.01$		$M = 0.26$		$M = 0.01$		$M = 0.26$				
	$\Delta p_{hy}^E (\%)$	$ \vec{u}_{max} $	$Mach_{max}$		$\Delta p_{hy}^E (\%)$	$ \vec{u}_{max} $	$Mach_{max}$		$\Delta p_{hy}^E (\%)$	$ \vec{u}_{max} $	$Mach_{max}$
10	2.280	1.651×10^{-5}	2.860×10^{-5}	2.333	1.542×10^{-6}	2.671×10^{-6}	10.381	7.134×10^{-6}	5.687×10^{-5}		
100	1.811	1.752×10^{-6}	3.035×10^{-6}	2.318	1.587×10^{-6}	2.749×10^{-6}	19.433	5.698×10^{-6}	1.858×10^{-5}		
1000	2.009	1.606×10^{-7}	2.782×10^{-7}	1.279	2.382×10^{-7}	4.126×10^{-7}	26.733	4.894×10^{-6}	1.758×10^{-5}		

Il est déduit du Tableau 4.1 que la mobilité d'interface M n'a pas une influence significative à faible rapport de masses volumiques, pour le modèle **CGM II**. Avec un rapport $\lambda = 10$, le modèle **CGM I** a une plus faible magnitude de vitesse que **CGM II**. Or, en augmentant le rapport λ , les courants parasites diminuent significativement pour le modèle **CGM II**. La diminution du modèle **CGM I** n'est pas significative. L'erreur relative $\Delta p_{hy}^E (\%)$ est plus grande pour le modèle **CGM I**, d'autant que le rapport de masses volumiques augmente. Cette erreur est indépendante du rapport λ pour le modèle **CGM II**.

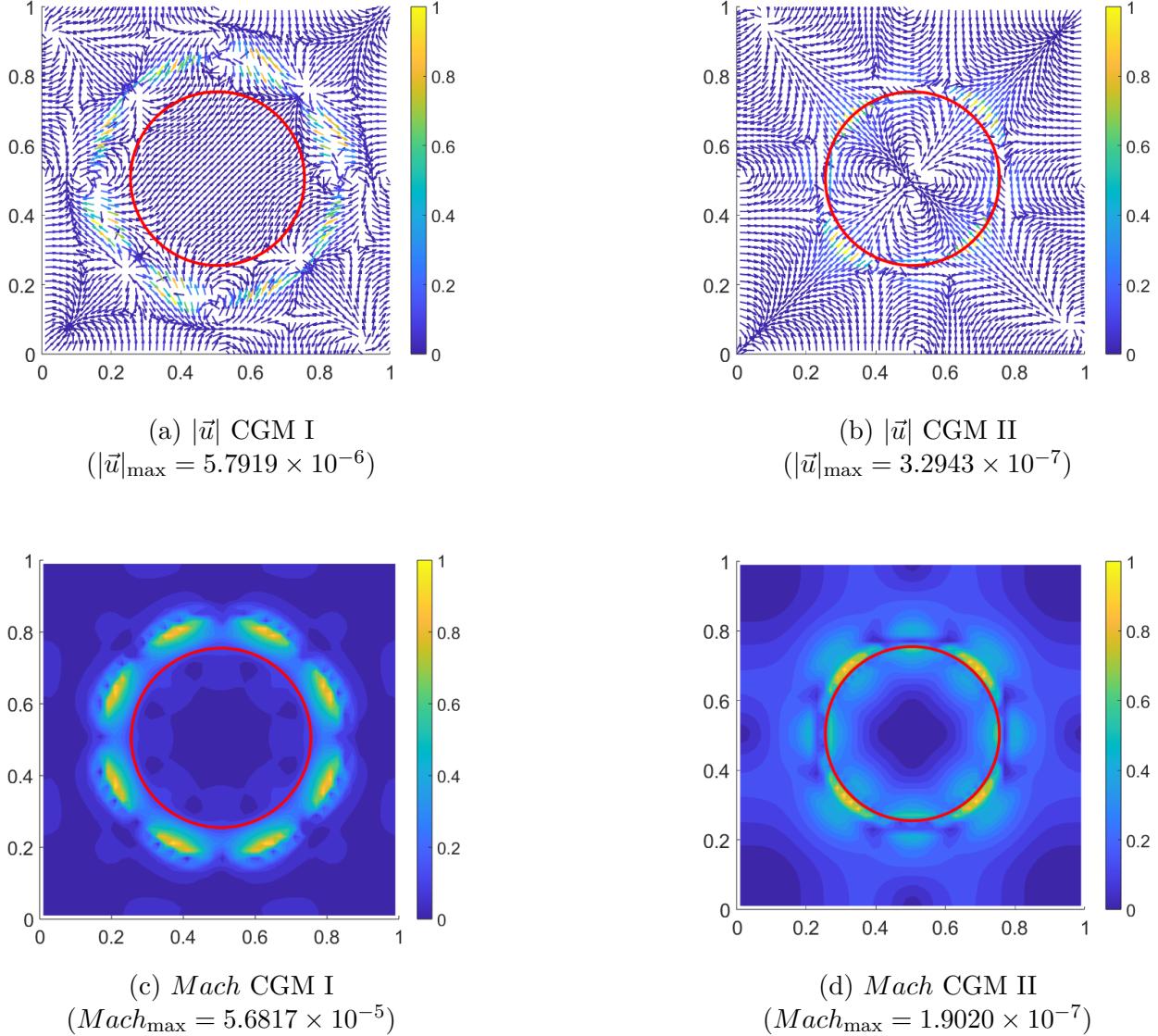


FIGURE 4.4 Profils de vitesse et du nombre de *Mach*, mettant en évidence les courants parasites pour le cas test des gouttelettes stationnaires, avec une tension superficielle σ de 0.01 et un rapport de masses volumiques de 1000. Les vitesses sont de l'ordre de 10^{-6} et 10^{-7} pour **CGM I** et **CGM II**. Pour le nombre de *Mach* $= \frac{|\vec{u}|}{c_s}$, les valeurs ont une grandeur de magnitude respective de 10^{-5} et 10^{-7} . Pour les nœuds avec la présence des deux phases dans le modèle **CGM I**, le nombre de *Mach* est calculé par une pondération de la vitesse du son de chaque phase selon sa valeur respective du champ de couleur. L'échelle de couleur est normalisée par les valeurs maximales respectives pour visualiser le profil de l'interface et de vitesse

4.3.2 Écoulement de Poiseuille à deux couches

La deuxième application numérique est l'écoulement de Poiseuille à deux couches, inspiré de l'exemple présenté en [39]. Le problème est représenté par un écoulement avec deux phases immiscibles, situé entre deux plaques fixes infinies. Un gradient de pression est appliqué aux fluides. Pour simuler ce gradient, une force de volume sera introduite dans la simulation. L'un des buts de ce cas test est d'étudier la capacité du modèle numérique à capturer la discontinuité présente à l'interface due au rapport de masses volumiques λ non unitaire, en plus de vérifier l'implémentation de la force de volume. Ce cas test permet également d'examiner et de démontrer la force de l'application de l'outil numérique développé pour respecter l'invariance galiléenne. La Figure 4.5 présente une illustration de la solution initiale du problème. Le nombre de nœuds dans la direction y est égal à 1. Par conséquent, le problème

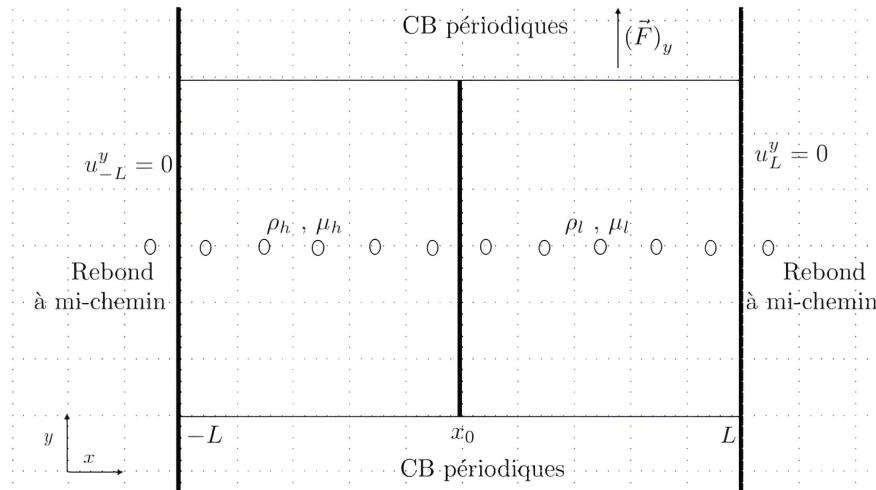


FIGURE 4.5 Solution initiale avec deux fluides entre deux plaques fixes. Des conditions de bord (CB) périodiques sont appliquées dans la direction y , et des conditions limites de rebond à mi-chemin dans la direction x . Le centre x_0 , déterminant la position de l'interface, est situé entre deux nœuds pour conserver la symétrie. Il est supposé que la phase la plus lourde est située à la moitié gauche du domaine dans cet exemple

2D peut être étudié comme un problème unidimensionnel. Le nombre d'éléments stockés dans les tableaux de stockage numérique est donc réduit. Les conditions d'adhérence (*no-slip*), qui doivent être appliquées entre les fluides et les plaques pour respecter la vitesse égale de 0 à ces endroits, sont récupérées par les conditions aux limites de rebond à mi-chemin, comme le montre la Figure 4.5. Les positions x varient dans l'intervalle $[-L, L]$ du domaine horizontal. Par symétrie, l'interface est située à $x = 0$. Un lissage initial est appliqué. De plus, il est à indiquer que la discrétisation dans l'espace physique est $\Delta x_{PHY} = 2L/nx$. Pour l'épaisseur, la valeur de β (**CGM I**) est fixée à 0.5, ce qui équivaut à $T = 4$ (**CGM II**). Le paramètre

libre α_l (**CGM I**) a une valeur de 4/9. La mobilité de l'interface (**CGM II**) est $M = 0.01$. La tension interfaciale est nulle. Le gradient de pression $(\vec{F})_y$ est représenté par une force de volume le long de l'axe y .

Le but de cette application est de vérifier si les deux modèles sont capables de simuler un écoulement à deux phases avec des rapports de masses volumiques et de viscosités élevés, tout en tenant compte d'un terme source, qui est la différence de pression dans le cas présent. Il est suggéré dans un premier temps de vérifier si les deux modèles sont bien construits pour récupérer la discontinuité qui apparaîtra dans le profil de quantité de mouvement. Il s'agit là d'un défi pour les modèles LBM traitant de l'écoulement de Poiseuille à deux couches.

Un profil théorique de la quantité de mouvement ρu^y a été donné dans [39], valide en absence de compressibilité, égal au produit de la masse volumique et de la vitesse verticale à chaque endroit selon les propriétés des phases à la moitié gauche $x-$ et droite $x+$ du domaine :

$$\rho u^y = \begin{cases} \frac{(\vec{F})_y L^2}{2\nu_{x-}^0} \left[-\left(\frac{x}{L}\right)^2 + \frac{x}{L} \left(\frac{\mu_{x-}^0 - \mu_{x+}^0}{\mu_{x-}^0 + \mu_{x+}^0} \right) + \frac{2\mu_{x-}^0}{\mu_{x-}^0 + \mu_{x+}^0} \right], & -L \leq x \leq 0 \\ \frac{(\vec{F})_y L^2}{2\nu_{x+}^0} \left[-\left(\frac{x}{L}\right)^2 + \frac{x}{L} \left(\frac{\mu_{x-}^0 - \mu_{x+}^0}{\mu_{x-}^0 + \mu_{x+}^0} \right) + \frac{2\mu_{x+}^0}{\mu_{x-}^0 + \mu_{x+}^0} \right], & 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (4.59)$$

où $(\vec{F})_y$ est la force de volume \vec{F}_b des modèles CGM. Cette force peut être écrite comme :

$$(\vec{F})_x = 0, (\vec{F})_y = \frac{u_c^y}{\mu_{x+}^0 + \mu_{x-}^0} L^2 \quad (4.60)$$

De plus, la simulation est réalisée de manière à toujours garder un nombre de Reynolds constant et choisi égal à 1 comme :

$$Re = \frac{u_c^y L}{\nu_{x-}^0} \quad (4.61)$$

en considérant que la force $(\vec{F})_y$ génère une vitesse du fluide total au centre du canal de u_c^y .

Après avoir effectué une analyse dimensionnelle, les “groupes Pi” obtenus sont :

$$\frac{L}{\rho_{x-}^0 \nu_{x-}^0} \rho u^y = f \left(\frac{x}{L}, \frac{\rho_{x+}^0}{\rho_{x-}^0}, \frac{\nu_{x+}^0}{\nu_{x-}^0}, \frac{u_c^y L}{\nu_{x-}^0} \right) \quad (4.62)$$

La nomenclature adoptée pour les simulations dans le cadre de cette application est présentée dans le Tableau 4.2. Les unités des variables macroscopiques sont des unités LBM. Le nombre de pas de temps nt après le lissage est fixé comme suit : $nt = \frac{300}{\Delta x_{PHY}^2}$. Pour le maillage le plus raffiné de 320 noeuds, le nombre de pas de temps devient 7678000 et le lissage de la solution initiale dure 50000 pas de temps. Cela montre que ce cas test peut être coûteux en calcul

TABLEAU 4.2 Nomenclature utilisée pour les cas de simulations de l'écoulement de Poiseuille. Des rapports de masses volumiques réels sont utilisés

Cas de simulation	Eau	Mercure	Hexane	ρ_{x-}^0	ρ_{x+}^0	ν_{x-}^0	ν_{x+}^0
MW	$x+$	$x-$	-	13579	998.2	0.0114	0.1004
HW	$x+$	-	$x-$	661.31	998.2	0.04695	0.1004
MH	-	$x-$	$x+$	13579	661.31	0.0114	0.04695

pour atteindre un état stationnaire.

Les résultats des simulations sont présentés dans la Figure 4.6, exposant la quantité $\frac{\rho u^y L}{(\rho_{x-}^0)(\nu_{x-}^0)}$ réduite de l'équation 4.62 en correspondance au domaine spatial adimensionnel.

En comparant le profil numérique et théorique de la quantité de mouvement dans la Figure 4.6, il est déduit que les deux modèles développés sont capables de reproduire le profil attendu et de suivre la discontinuité à l'interface. L'erreur la plus importante, visuellement, se situe à cette position ($\frac{x}{L} = 0$). Un raffinement important permet de réduire l'ampleur de cette erreur.

En outre, les erreurs entre la quantité de mouvement numérique et théorique des deux modèles sont évaluées et présentées dans le Tableau 4.3, ce qui permet d'estimer l'ordre de convergence correspondant. En posant que la quantité de mouvement adimensionalisée $Q = \frac{\rho u^y L}{(\rho_{x-}^0)(\nu_{x-}^0)}$, la norme de différence $\|Q\|_2$ est utilisée et le calcul de l'ordre correspondant entre deux maillages sont donnés par :

$$\text{Ordre} = \frac{\ln \left(\|Q^E\|^{nx=320} / \|Q^E\|^{nx=160} \right)}{\ln \left(\Delta x_{PHY}^{nx=320} / \Delta x_{PHY}^{nx=160} \right)} \quad (4.63)$$

$$\text{où } \|Q^E\|_2 = \|Q^t - Q^s\|_2 \quad (4.64)$$

TABLEAU 4.3 Erreurs $\|Q\|_2$ entre la quantité de mouvement numérique provenant de la simulation Q^s et théorique Q^t , adoptant le modèle de CGM I et **CGM II** pour l'application de Poiseuille à deux couches. L'ordre de convergence est calculé entre les deux maillages les plus fins

Cas de simulations	$nx = 40$	$nx = 80$	$nx = 160$	$nx = 320$	Ordre
MW	9.076×10^{-2}	5.408×10^{-2}	3.205×10^{-2}	1.913×10^{-2}	7.441×10^{-1}
	1.066×10^{-1}	6.209×10^{-2}	3.628×10^{-2}	2.129×10^{-2}	7.694×10^{-1}
HW	4.521×10^{-2}	2.929×10^{-2}	1.881×10^{-2}	1.183×10^{-2}	6.691×10^{-1}
	9.372×10^{-2}	5.350×10^{-2}	3.010×10^{-2}	1.685×10^{-2}	8.371×10^{-1}
MH	8.938×10^{-2}	5.462×10^{-2}	3.319×10^{-2}	2.022×10^{-2}	7.154×10^{-1}
	1.060×10^{-1}	6.404×10^{-2}	3.906×10^{-2}	2.403×10^{-2}	7.012×10^{-1}

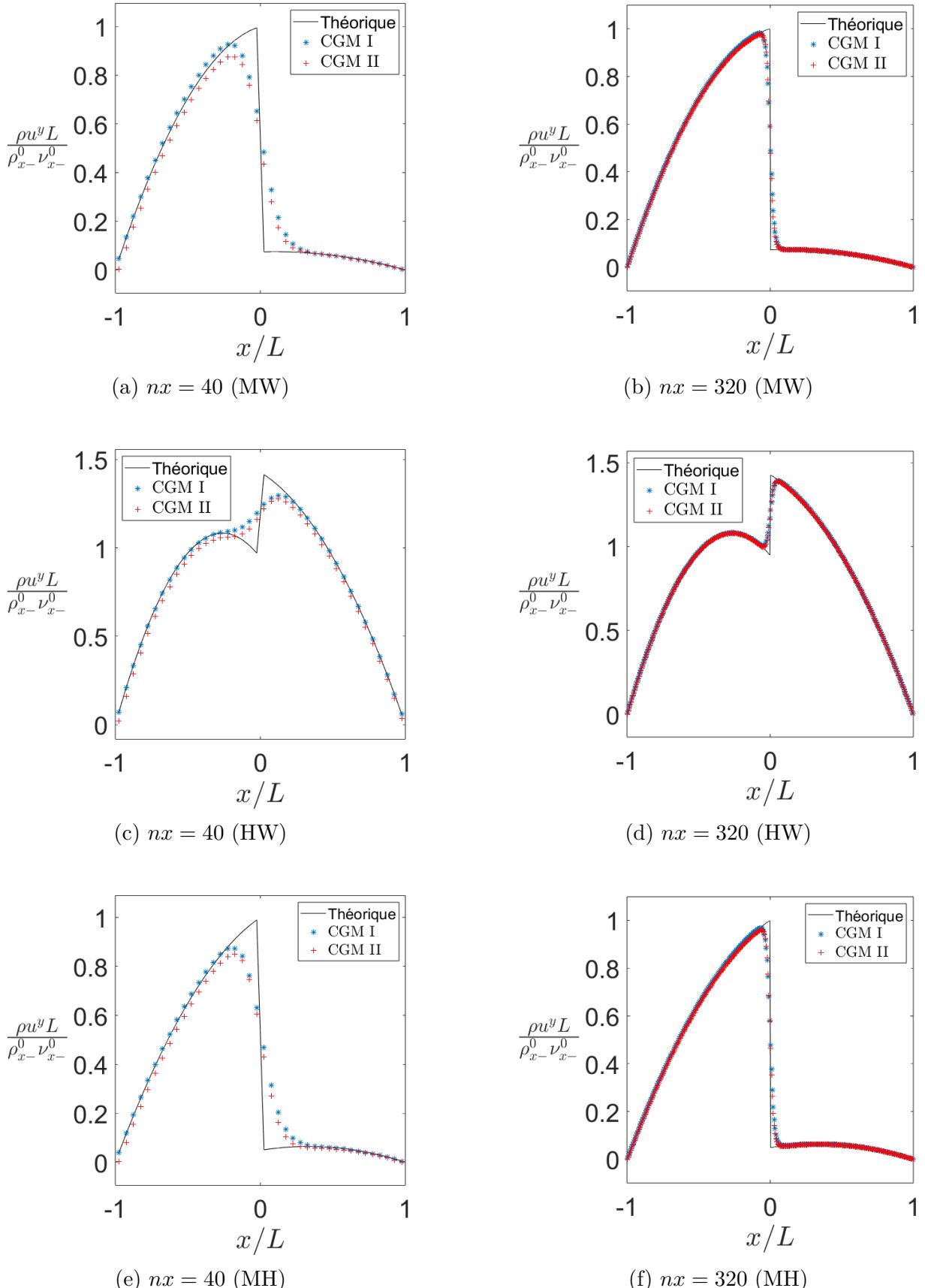


FIGURE 4.6 Profil de la quantité de mouvement de l'écoulement de Poiseuille à deux couches avec un nombre de Reynolds unitaire, pour différents raffinements de l'espace : $nx = 40$ et $nx = 320$

Les erreurs du Tableau 4.3 valident les observations précédentes pour le profil de quantité de mouvement dans la Figures 4.6. La tendance des erreurs est de même grandeur si une comparaison est effectuée pour les deux modèles pour les cas **MW** et **MH**, mais ces erreurs sont globalement plus faibles pour le modèle de **CGM I**. En comparant les deux modèles, le modèle **CGM I** semble plus précis pour un maillage plus grossier, en particulier aux endroits proches de l'interface en visualisant la Figure 4.6, pour les trois cas **MW**, **HW** et **MH**. La valeur d'ordre supérieure est de 0.84 pour le modèle **CGM II** dans le cas **HW**, tandis que sa valeur inférieure est de 0.67 pour le modèle **CGM I** dans le même cas. Ceci indique qu'à faible rapport de masses volumiques et de viscosités cinématiques, raffiner la maillage aboutit à une réduction plus significative de l'erreur numérique dans le **CGM II**. Le dernier cas **MH** correspond au rapport de masses volumiques le plus élevé. Par ailleurs, il convient de noter que pour les cas **MW** et **HW**, l'ordre de convergence peut être plus élevé en adoptant une épaisseur d'interface plus petite, relative à la taille du maillage. En générale, les résultats entre les deux modèles CGM sont similaires pour ce cas test.

4.3.3 Instabilité de Rayleigh-Taylor

Le troisième cas test est un écoulement avec un fluide à deux phases immiscibles où la phase avec la masse volumique la plus élevée se trouve au-dessus du fluide à faible masse volumique. Celui-ci est inspiré de l'application numérique réalisée par Subhedar [42]. Le but est d'étudier la capacité des deux modèles CGM à simuler un cas avec des interactions plus complexes qu'auparavant, soit celles entre les forces capillaires, de viscosité, et de gravité. Le domaine est rectangulaire avec $ny = 4nx$, puisque les phénomènes se produisent principalement le long de la deuxième dimension sous l'influence de la gravité. Les frontières supérieure et inférieure sont considérées comme des murs. Par conséquent, des conditions de bord de rebond à mi-chemin sont utilisées. Par ailleurs, des conditions aux limites périodiques sont appliquées aux limites gauche et droite. Cette description est illustrée dans la Figure 4.7.

Le système décrit forme un système en équilibre instable, comme l'a indiqué Subhedar dans son travail [42]. De ce fait, la réalisation de cette simulation permet de vérifier la capacité des modèles développés à confronter une physique complexe. En effet, la topologie de l'interface commencera à changer après l'application de la perturbation initialement et sous l'effet de gravité par la suite. Les forces capillaires et visqueuses entrent alors en jeu et doivent être simulées adéquatement. La position verticale $y(x)$ du profil d'interface adopté est exprimée comme suit :

$$y(x) = 2L + \frac{L}{10} \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \quad (4.65)$$

La longueur le long de la direction x est L , avec une valeur fixée à 256 en unité LBM. Le

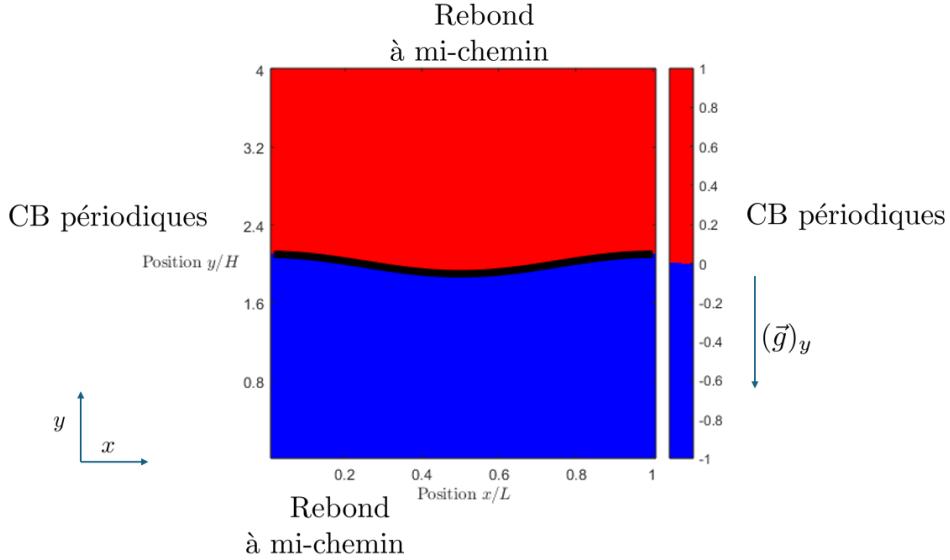


FIGURE 4.7 Solution initiale pour l’instabilité de Rayleigh-Taylor en 2D. L’interface est représentée en noir ($\varphi_I = 0$). Le fluide à haute masse volumique est situé à la moitié supérieure du domaine. La force de volume \vec{F}_b des modèles CGM est représentée par la force de gravité $(\vec{g})_y$

second terme de l’addition dans l’équation 4.65 est la perturbation introduite et appliquée à l’interface initialement plane. Cette perturbation doit normalement causer une instabilité au système, dans lequel la topologie de l’interface changera ensuite avec le temps. Ce phénomène examiné est appelé l’instabilité de Rayleigh-Taylor.

Le rapport de masses volumiques en premier temps choisi est de $\lambda = 3$, avec un rapport de viscosités unitaire. Cela permettra de comparer entre le modèle **CGM I** et **CGM II**. Certains nombres adimensionnels sont définis, à savoir le nombre de Reynolds Re , le nombre d’Atwood At , le nombre capillaire Ca et l’échelle de temps adimensionnel du processus \tilde{t} , avec leurs valeurs correspondantes :

$$Re = \frac{LU}{\nu_h^0}, U = \sqrt{L \cdot |(\vec{g})_y|} \quad (4.66)$$

$$At = \frac{\rho_h^0 - \rho_l^0}{\rho_h^0 + \rho_l^0} \quad (4.67)$$

$$Ca = \frac{\mu_h^0 U}{\sigma} \quad (4.68)$$

$$\tilde{t} = \sqrt{\frac{L}{|(\vec{g})_y| At}} \quad (4.69)$$

La vitesse caractéristique est U , avec une valeur de la force de gravité de $(\vec{g})_y = -2 \times 10^{-6}$.

Les valeurs des simulations pour M sont de 0.01, pour β de 0.5, ce qui correspond respectivement à $\alpha_l = \frac{4}{9}$, et à $T = 4$. Il est à noter que la durée du lissage initial est de 10000 pas de temps. Le tableau 4.4 indique les trois simulations exécutées pour le cas test étudié.

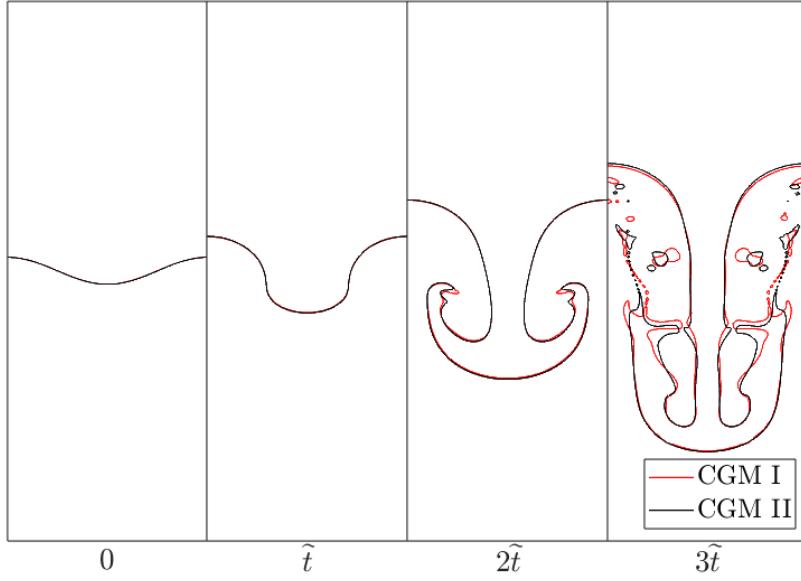
TABLEAU 4.4 Valeurs des nombres adimensionnels d'Atwood At , de Reynolds Re , et le nombre capillaire Ca pour chaque simulation étudiée

Simulation	At	Re	Ca
<u>a</u>	0.50	3000	0.26
<u>b</u>	0.95	300	0.44
<u>c</u>	0.98	300	0.44

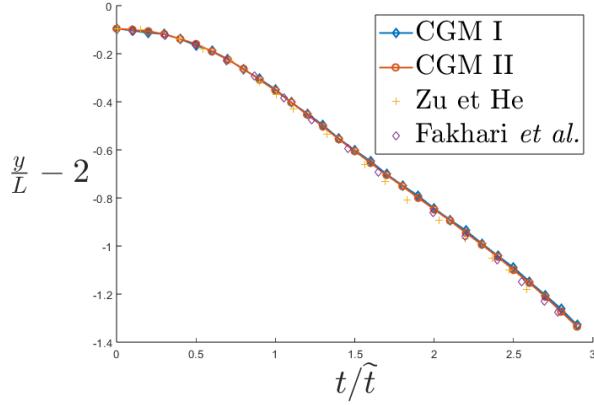
En passant à l'analyse des résultats extraits des simulations réalisées, le comportement de l'interface est étudié et montré dans la Figure 4.8 avec les mêmes valeurs indiquées que la simulation a, en fonction du temps caractéristique \tilde{t} .

Il est alors déduit que les deux modèles ont à peu près la même solution, surtout aux temps initiaux. L'effet de la gravité et la perturbation introduite à l'interface sont observables. Certaines différences deviennent de plus en plus claires aux temps avancés. Pour comparer les résultats avec les données de la littérature (par exemple dans l'article de Fakhari *et al.* [74], et les travaux de Zu et He [43], utilisant tous deux le modèle du champ de phase), il est intéressant de vérifier l'évolution temporelle de la position frontale de la bulle $x = 0$ (Figures 4.8c) et celle du liquide à haute masse volumique $x = \frac{L}{2}$ (Figures 4.8b) formées. Le comportement temporel de l'interface est présenté dans la Figure 4.8a. Globalement, les résultats des modèles **CGM I** et **CGM II** sont similaires aux résultats extraits de la littérature. Cependant, des oscillations sont observées pour le premier modèle **CGM I**, en particulier dans le profil de la position frontale de la bulle dans la Figure 4.8c. L'origine de ces oscillations est estimée être la propagation d'une onde de pression dans le système d'étude pendant l'initialisation, en raison de la différence de masse volumique et en particulier à cause de la différence de vitesse du son dans chaque région du fluide, caractéristique du **CGM I** seulement.

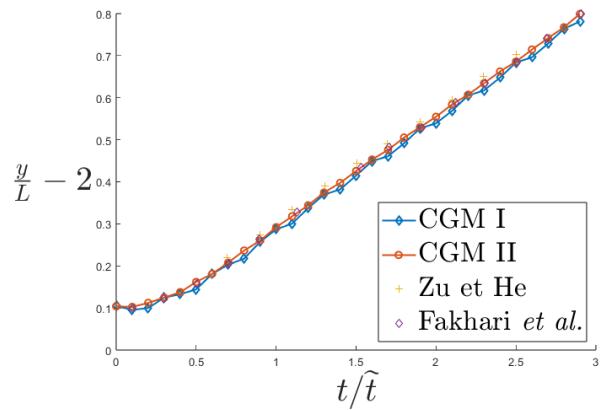
Cela peut également expliquer l'incapacité de ce modèle à simuler cette application avec des rapports de masses volumiques plus élevés (par exemple $At = 0.75$ ou $At = 0.95$, ce qui correspond à des rapports de masses volumiques de 7 et 40 respectivement). D'autre part, le modèle **CGM II** est capable de simuler ces cas, même avec l'opérateur de collision SRT, et le résultat du cas de la simulation b est présenté dans la Figure 4.9, pour le comportement de l'interface à différents moments. Cette dernière application montre donc un avantage pour le modèle de **CGM II**, pour des rapports de masses volumiques relativement élevés avec des phénomènes complexes.



(a) Comportement temporel de l'interface sous l'instabilité de Rayleigh-Taylor à $t = 0$, $t = \tilde{t}$, $t = 2\tilde{t}$, et $t = 3\tilde{t}$. L'interface est illustrée en noir



(b) Position frontale du liquide à haute masse volumique ($x = \frac{L}{2}$)



(c) Position frontale de la bulle ($x = 0$)

FIGURE 4.8 Résultats numériques des modèles **CGM I** et **CGM II**, en termes du comportement de l'interface et de comparaison de sa position avec des données de littérature, pour la simulation a du cas test de l'instabilité de Rayleigh-Taylor

Cependant, il faut souligner que ce modèle prend un temps supérieur de calcul, en raison de la nécessité de passer par des itérations pour estimer la vitesse et la pression. Le modèle **CGM I** nécessite moins de temps d'exécution pour ce cas test, soit d'environ 10%. Dans son article, Subhedar [42] explique qu'une attention particulière est nécessaire pour les simulations de ratio de haute masse volumique dans ce cas test. Si l'interface est trop fine au moment initial, la vitesse des deux fluides peut augmenter de manière significative et aboutir à des valeurs non physiques : des vitesses proches ou égales à la vitesse du son.

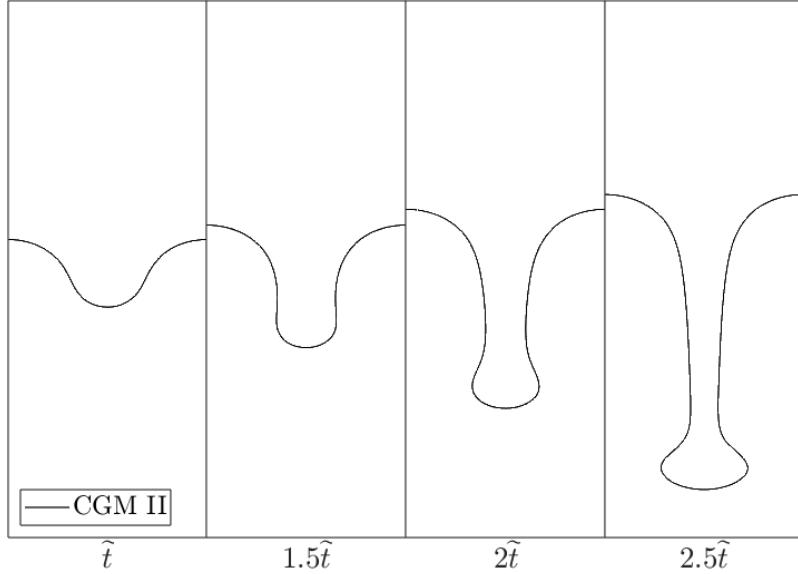


FIGURE 4.9 Évolution temporelle de l'interface sous l'instabilité de Rayleigh-Taylor à $t = 0$, $t = 1.5t_0$, $t = 2t_0$, et $t = 2.5t_0$. L'interface est illustrée en noir (Simulation b)

Un nombre de Reynolds plus faible est fixé pour essayer d'atteindre un rapport de masses volumiques plus élevé (Simulation c), en faisant varier la valeur de la viscosité en d'autres termes. Il a donc été possible d'essayer de simuler un nombre d'Atwood de 0.98 ($\lambda = 99$), avec $Re = 300$ et $Ca = 0.44$. Pour cette simulation en particulier, les instabilités commencent à émerger à un moment avancé, pour environ 60000 pas de temps, c'est-à-dire $\frac{t}{t_0} = 2.5$. Ainsi, la stabilité avec un nombre d'Atwood de 0.98 ($\lambda = 99$) n'est pas atteignable avec une relaxation simple SRT, avec l'ensemble de paramètres choisis. Le modèle **CGM II** est très sensible au nombre d'Atwood (donc au rapport de masses volumiques). Une valeur élevée du nombre d'Atwood avec une valeur élevée du nombre de Reynolds (e.g. 3000) provoque des instabilités numériques dans le modèle. Comme les simulations avec un rapport de masses volumiques plus élevé de 1000 et un nombre de Reynolds élevé de 3000 ne sont pas stables également, où les calculs de masse donnent des erreurs numériques, il peut être pertinent de construire un nouveau modèle avec un facteur de relaxation de type MRT, comme présenté par Subhedar.

Ce dernier est rapporté être plus performant que le type BGK pour les rapports de masses volumiques et de viscosités élevés, comme indiqué dans [42].

4.3.4 Sommaire

En somme, les résultats du **Chapitre 4** ont appuyé la prémissé que les deux modèles **CGM I** et **CGM II** sont capables de simuler des écoulements à deux phases en capturant adéquatement l’interaction entre les deux phases, avec des rapports de masses volumiques et viscosités cinématiques non unitaires. Le modèle **CGM II** est plus avantageux dans des cas de haut rapport de masses volumiques, permettant en particulier des courants parasites moins importants et un nombre de *Mach* plus faible en conséquence. Les deux modèles CGM traitent convenablement les cas avec un champ externe de force comme un terme source, pour des cas stationnaires. Un saut de quantité de mouvement à cause d’un rapport de masses volumiques et de viscosités cinématiques entre deux phases est correctement capturé. Pour des cas instationnaires, le modèle **CGM I** n’est pas capable de simuler l’exemple de Rayleigh-Taylor avec rapports de masses volumiques relativement élevés. L’utilisation d’une relaxation de type SRT n’est probablement pas suffisante pour atteindre un rapport de masses volumiques très élevé même pour le **CGM II**.

À la suite de la comparaison entre les deux modèles CGM en ce qui concerne la capture de l’interaction fluide-fluide dans divers scénarios, une étape intermédiaire et cruciale est nécessaire avant de parvenir à la modélisation de l’impact de gouttelette sur une surface solide, soit l’implémentation des conditions de mouillabilité. Ceci sera l’objet du chapitre suivant.

CHAPITRE 5 CONTACT FLUIDE-SOLIDE DE GOUTTELETTE EN RÉGIME STATIONNAIRE

Le travail effectué a porté sur la vérification du programme informatique et l'examen des deux méthodes numériques élaborées dans la librairie numérique du laboratoire de recherche, soit du modèle de Leclaire *et al.* [40] (**CGM I**) et de Subhedar [42] (**CGM II**), permettant de relever certains points forts et limites. Un travail supplémentaire de mise en œuvre des conditions aux limites est mené. Le but est de développer un modèle de mouillabilité compatible avec les deux modèles **CGM I** et **CGM II**. Différentes simulations 2D de vérification seront effectuées avec des surfaces solides planes.

Le nouveau schéma à développer dans le laboratoire de recherche actuel permettra d'assigner librement l'angle de contact et de le contrôler. Il s'inspirera de la méthode attrayante proposée par le travail d'Akai *et al.* [46]. Cette approche sera testée dans le présent chapitre pour des scénarios statiques en particulier.

Les sections suivantes sont organisées comme suit : Une première section expose l'approche suivie pour l'implémentation numérique de la condition de mouillabilité. Une deuxième section présente la condition initiale du scénario d'angle statique étudié, avant de décrire les étapes additionnelles de la méthodologie numérique. Enfin, la quatrième section regroupe les résultats recueillis, accompagnés de discussions et des points importants à relever. Tout en mesurant l'angle de contact final, les cas tests consisteront en des rapports unitaires et des hauts rapports de masses volumiques. Des maillages raffinés seront adoptés pour étudier la précision des deux modèles. Les résultats des deux CGMs seront comparés au fur et à mesure.

5.1 Implémentation des conditions limites de mouillabilité

Après avoir présenté le modèle de mouillabilité d'Akai *et al.* [46] d'un point de vue théorique dans la section 2.4 de la revue de littérature, il est proposé de se concentrer sur l'aspect numérique de son implémentation.

À chaque pas de temps, l'orientation du gradient de couleur est corrigée pour correspondre à l'angle de contact statique prévu au point triple. L'angle de contact doit être corrigé avant l'étape de recoloration pour assurer une reconstruction de l'interface compatible avec l'orientation adéquate du gradient de couleur $\vec{\nabla}\varphi$. La Figure 5.1 présente une visualisation schématique de cette technique, telle qu'elle est utilisée. Les calculs sont effectués en fonction des éléments suivants :

1. L'entrée est l'angle de contact imposé θ_c , et le gradient du champ de couleur $\vec{\nabla}\varphi$. Le vecteur définissant l'orientation du champ de couleur normalisé du gradient de couleur \vec{n}_φ est évalué : $\vec{n}_\varphi = \vec{\nabla}\varphi / |\vec{\nabla}\varphi|$.
2. Le vecteur normal à la frontière \vec{n}_s est initialement défini (le mur est supposé immobile). L'angle θ' entre \vec{n}_s et \vec{n}_φ est calculé comme suit :

$$\cos(\theta') = \vec{n}_s \cdot \vec{n}_\varphi \quad (5.1)$$

3. Deux vecteurs normaux unitaires \vec{n}_+ et \vec{n}_- sont évalués par :

$$\vec{n}_+ = \left(\cos(+\theta_c) - \frac{\sin(+\theta_c) \cos(\theta')}{\sin(\theta')} \right) \vec{n}_s + \frac{\sin(+\theta_c)}{\sin(\theta')} \vec{n}_\varphi \quad (5.2)$$

$$\vec{n}_- = \left(\cos(-\theta_c) - \frac{\sin(-\theta_c) \cos(\theta')}{\sin(\theta')} \right) \vec{n}_s + \frac{\sin(-\theta_c)}{\sin(\theta')} \vec{n}_\varphi \quad (5.3)$$

Ces deux vecteurs \vec{n}_+ et \vec{n}_- sont les deux candidats possibles qui représentent une rotation d'un angle de $+\theta_c$ ou $-\theta_c$ du vecteur \vec{n}_s .

4. La distance $dist(\cdot)$ entre les deux vecteurs normaux résultant du calcul de l'étape 3 et le gradient du champ de couleur est évaluée :

$$dist(\vec{n}_+) = |\vec{n}_+ - \vec{n}_\varphi| \quad (5.4)$$

$$dist(\vec{n}_-) = |\vec{n}_- - \vec{n}_\varphi| \quad (5.5)$$

5. Le vecteur normal entre \vec{n}_+ et \vec{n}_- ayant la distance la plus courte par rapport à l'orientation actuelle \vec{n}_φ du champ de couleur est sélectionné et sauvegardé en tant que nouvelle orientation finale \vec{n}_F (*final*) :

$$\vec{n}_F = \begin{cases} \vec{n}_+ & \text{si } dist(\vec{n}_+) < dist(\vec{n}_-), \\ \vec{n}_- & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.6)$$

6. Enfin, l'orientation du gradient de couleur $\vec{\nabla}\varphi$ original est remplacé par la nouvelle orientation \vec{n}_F , mais sans changer la norme originale du gradient de couleur.

$$\vec{\nabla}\varphi := \frac{\vec{n}_F}{|\vec{n}_F|} |\vec{\nabla}\varphi| \quad (5.7)$$

Le symbol “:=” désigne une assignation. Le vecteur normal au solide \vec{n}_s est $(0, -1)$ dans ce travail. La norme $|\vec{n}_F|$ n'est pas nécessairement égale à 1, étant donné que les vecteurs \vec{n}_+

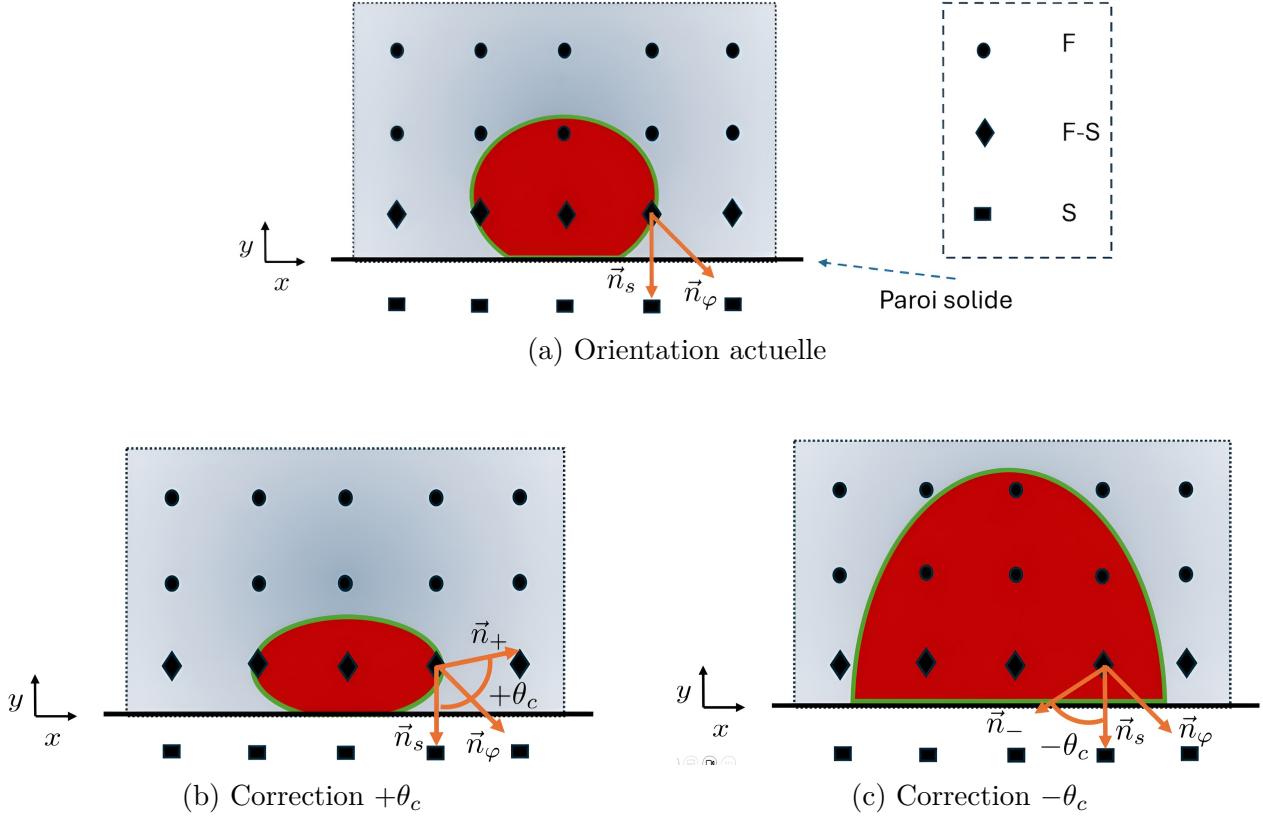


FIGURE 5.1 Représentation schématique des deux corrections possibles de la direction du gradient de couleur utilisées pour la condition limite de mouillabilité. L’angle $θ_c$ est l’angle de rotation dans ce cas entre \vec{n}_s et \vec{n}_+ ou \vec{n}_- . Les noeuds sont de type fluides (F), fluides en contact avec le solide (F-S) et noeuds solides (S)

et \vec{n}_- sont des combinaisons linéaires de \vec{n}_s et \vec{n}_φ , régis par les équations 5.2 et 5.3. De ce fait, le vecteur $|\vec{n}_F|$ est normalisé pour éviter de changer l’orientation de $\vec{\nabla}\varphi$ final. Dans le cas contraire, des erreurs numériques s’accumulent et l’orientation de $\vec{\nabla}\varphi$ demeure inexacte.

Pour l’exemple présenté dans la Figure 5.1, le vecteur unitaire normal \vec{n}_+ du gradient de couleur après la correction avec $+θ$ a une distance euclidienne plus courte au vecteur souhaité formant l’angle de contact prescrit, que la correction à l’orientation opposée. C’est donc le vecteur \vec{n}_+ qui est choisi à ce pas de temps comme nouvelle orientation du gradient de couleur. Telle qu’illustré à la Figure 5.1, cette correction est appliquée aux noeuds de type **F-S**. Les noeuds de type **S** sont utilisés comme “noeuds fantômes” (*ghost nodes*), pour stocker des données temporaires utilisées dans le seul but de la réalisation de la condition limite de rebond complet (*Fullway bounce-back*). La norme du gradient de couleur, soit la longueur du vecteur associé, est maintenue constante.

5.2 Condition initiale

La solution initiale est modifiée de manière à ce que la gouttelette soit en contact avec le bord inférieur. Un choix pour l'expression analytique du champ de couleur φ de la solution initiale est donné par :

$$\varphi = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left[\frac{2(r - R_0)}{T} \right] \right] \quad (5.8)$$

La distance r est la distance entre la position de chaque point du domaine et la position du centre de la gouttelette. La variable dimensionnelle R_0 est le rayon de la gouttelette. Elle est ajustée pour respecter la position prévue de la gouttelette initiale, illustrée dans la Figure 5.2. La forme initiale de la gouttelette est contrôlée par le centre de la gouttelette le long de l'axe y : $y_{\text{centre}} = H_h^0 - R_0 + 1$, où H_h^0 est la valeur de la hauteur de la solution initiale de la gouttelette. Après avoir calculé le champ de couleur φ , la solution initiale utilisant les variables LBM est calculée à travers la fonction de distribution d'équilibre $f_i^{(e)}$ à vitesse nulle, où la masse volumique initiale ρ^0 de chaque fluide et la variable d'ajustement de la mobilité χ_i entrent en jeu.

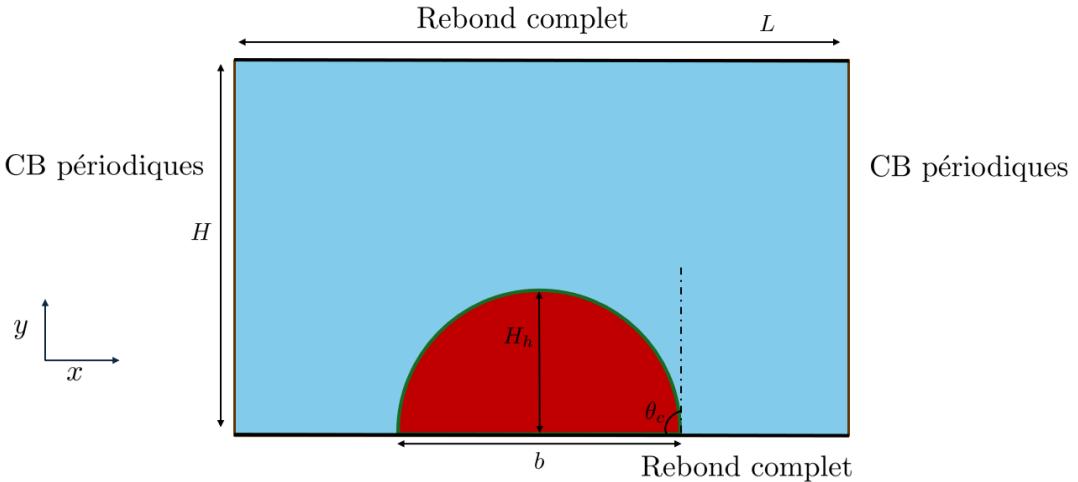


FIGURE 5.2 Schéma descriptif de la solution initiale de la phase à forte masse volumique avec une gouttelette demi-circulaire de rayon $R_0 = 25$ dans un domaine rectangulaire ($L \times H$). L'angle de contact dans ce cas particulier est $\theta_c = 90^\circ$, et la hauteur de la gouttelette $b = 2H_h$, où b la distance de contact entre la gouttelette et la surface solide. Des conditions périodiques sont appliquées aux frontières verticales, et des conditions de non-glissement sont optées pour les parois solides, avec une vitesse du fluide initiale nulle. La condition de mouillabilité sera considérée par imposition de l'angle de contact θ_c et la correction de l'orientation du gradient de couleur $\vec{\nabla}\varphi$

5.3 Procédure numérique

En se basant toujours sur la méthodologie de la section 4.3, les étapes additionnelles nécessaires pour la modélisation de l'angle de contact statique et de l'étude de post-traitement correspondante sont résumées comme suit :

- Pour l'étape de perturbation, le gradient de couleur $\vec{\nabla}\varphi$ doit être évalué (dérivées premières). Pour rappel, dans les zones fluides loin des frontières, des approximations pondérées sont utilisées pour chaque noeud en exploitant les 9 valeurs des vitesses \vec{c}_i par rapport à l'équation 4.22. Le même type de calculs est effectué pour évaluer le Laplacien du champ de couleur $\nabla^2\varphi$ (dérivées secondes), comme dans l'équation 4.46. Toutefois, cela est compatible avec les scénarios dans lesquels toutes les conditions aux limites sont de type périodique. Dans le cas de parois solides et de conditions de mouillabilité, les valeurs résultantes pour les noeuds fluides en contact avec les frontières solides sont incohérentes avec cette méthodologie. Par conséquent, les calculs du gradient du champ de couleur et de son Laplacien à l'aide des équations 4.22 et 4.46 ne sont pas utilisés dans les noeuds de type **F-S** en contact avec des parois solides, illustrés dans Figure 5.1. Au lieu de cela, des calculs utilisant des approximations de différences finies sont adoptés, pour calculer les différents types de dérivées nécessaires (avant, arrière, ou centrée). Les approximations utilisées présentent une erreur de troncature de second ordre à ces endroits. Il a été déduit que les approximations de premier ordre peuvent donner des résultats inexacts. L'expression analytique des différences finies adoptées est présentée dans l'annexe C.
- Les simulations sont arrêtées lorsque la différence respecte la condition : $\epsilon_{30} \leq 10^{-9}$, avec $\zeta \equiv \varphi$, ou lorsqu'un nombre maximum de pas de temps est atteint lors de la comparaison entre **CGM I** et **CGM II**.
- Deux itérations seulement sont appliquées pour les itérations de type point fixe du modèle **CGM II** pour les champs de vitesse \vec{u} et de pression p associés aux équations 4.43 et 4.44. En effet, pour les écoulements stationnaires, les pas de temps peuvent servir d'itérations de point fixe. Même si la solution transitoire n'est pas physique, cette approche est adoptée car seulement la solution au régime stationnaire fera l'objet d'étude, et donc la solution transitoire n'est pas considérée.
- Pour l'analyse de post-traitement, il est nécessaire de choisir une technique adéquate pour mesurer l'angle de contact, pour une solution à n'importe quel pas de temps. Il est suggéré d'utiliser une approche géométrique. En supposant que la gouttelette ait une forme circulaire, et que la distance de contact soit b et sa hauteur H_h comme

indiqué sur la Figure 5.2, l'expression suivante 5.9 est utilisée [16] :

$$\theta_c = \tan^{-1} \left(\frac{b}{2(r - H_h)} \right) \quad (5.9)$$

$$\text{où } r = \frac{4 \cdot H_h^2 + b^2}{8 \cdot H_h} \quad (5.10)$$

Dans le cas où le résultat de l'équation 5.9 est négatif, l'angle de contact est ajusté en ajoutant 180° à sa valeur, afin de s'assurer que la mesure est réalisée dans le bon côté du domaine ($\theta_c \in [0^\circ, 180^\circ]$).

La distance b est calculée en considérant les valeurs de l'abscisse maximale et minimale à partir du centre $(x_{\text{centre}}, 0)$, pour lequel la valeur du champ de couleur φ est supérieure à celle de l'interface. Avec cette même condition, la distance H_h est évaluée en déterminant la valeur de l'ordonnée maximale à partir du même centre. Une interpolation linéaire est adoptée pour les deux mesures.

5.4 Angle de contact statique en 2D

Les simulations de cette section porteront sur une gouttelette 2D reposant sur une paroi solide. En particulier, la qualité de l'imposition de l'angle de contact souhaité pour le rapport de masses volumiques unitaire est étudié dans un premier temps, avant d'étendre les rapports de masses volumiques entre la gouttelette et le fluide environnant à des valeurs aussi élevées que 1000. Pour le premier cas test où $\theta_c = 90^\circ$, les modèles CGM sont comparés. Les courants parasites sont aussi mise en avant en illustrant le profil de vitesse à l'état stationnaire. Ensuite, différentes tailles de maillages sont utilisées pour étudier la précision et les ordres de convergence des modèles développés. Cela permettra une vérification plus approfondie du code de mouillabilité. Enfin, des simulations similaires avec des rapports de propriétés physiques différentes sont réalisées, relevant l'ordre de convergence également.

5.4.1 Rapport de masses volumiques unitaire

Deux fluides de même masse volumique (et viscosité cinématique) de 1 sont considérés. Comme première simulation, un angle de contact de $\theta_c = 90^\circ$ est imposé. Il est à noter qu'une valeur parfaite de 90° n'est pas attendue dans le calcul du post-traitement, en raison de la singularité mathématique de la fonction tangente : $\tan(90^\circ)$ est infinie. Toutefois, ce problème est résolu en imposant directement un angle de contact de 90° dans le cas suivant : $b = 2 \cdot H_h$. La même règle s'applique aux mesures de distance. Le but est de capturer de manière adéquate l'emplacement de l'interface. Le résultat analytique est $(H_h, b) = (15, 30)$.

Une première vérification de l'orientation du gradient de couleur est réalisé en annexe D. Les dimensions, variables et paramètres par défaut du maillage sont indiqués dans le Tableau 5.1, mettant en évidence les entrées utilisées permettant l'initialisation des calculs.

TABLEAU 5.1 Dimensions du maillage par défaut, variables et paramètres utilisés pour les simulations en unité LBM

Paramètre / Variable	Symbole	Valeur
Taille du maillage (direction x)	nx	100
Taille du maillage (direction y)	ny	30
Masse volumique de la phase h	ρ_h^0	1
Masse volumique de la phase l	ρ_l^0	1
Viscosité cinématique de la phase h	ν_h^0	0.025
Viscosité cinématique de la phase l	ν_l^0	0.025
Hauteur de la gouttelette	H_h	30
Distance de contact de la gouttelette	b	15
Tension interfaciale	σ	0.01
Reconstructeur d'interface ou Épaisseur	β ou T	0.4 ou 5.0

L'état stationnaire est atteint après 50000 pas de temps pour le modèle **CGM II**, et 27000 pas de temps pour le modèle **CGM I**. Il est à rappeler que pour le **CGM II** l'état instationnaire n'est pas capturé, car les itérations du point fixe ne sont résolues qu'à l'état stationnaire. Pour ce premier cas, l'état d'équilibre est considéré comme atteint lorsque l'angle de contact final mesuré ne varie pas de quatre décimales. À partir de ce point, le nombre total de pas de temps simulés pour les deux modèles est de 50000.

Le champ de couleur à l'état stationnaire est présenté dans la Figure 5.5. Pour les deux modèles, les dimensions mesurées sont $(b, H_h) = (30, 15)$, ce qui correspond à 90° .

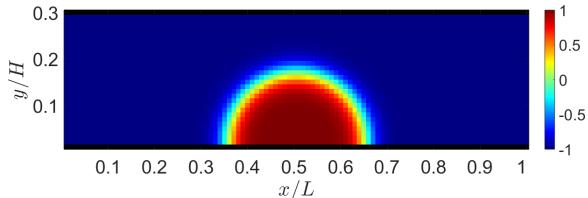


FIGURE 5.3 Modèle CGM I

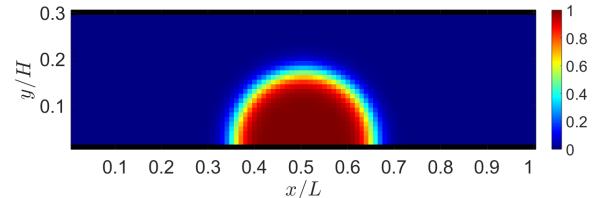


FIGURE 5.4 Modèle CGM II

FIGURE 5.5 Représentation du champ de couleur final dans le domaine 2D de $(nx \times ny) = (100 \times 30)$ avec $\theta_c = 90^\circ$ en utilisant la CGM

En outre, il est intéressant d'étudier l'ampleur du profil de vitesse des deux modèles, où des courants parasites peuvent se manifester.

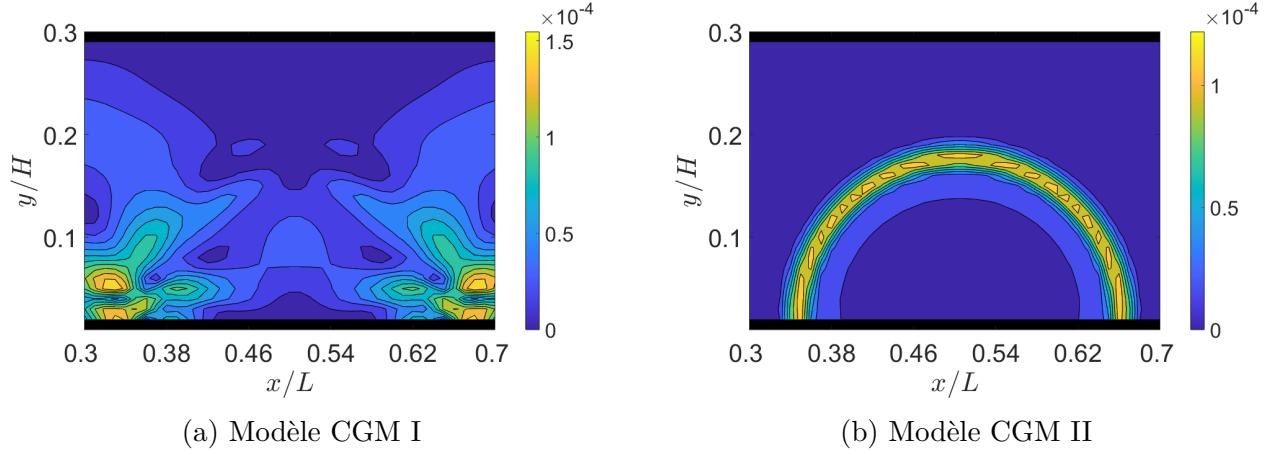


FIGURE 5.6 Graphique de l'amplitude du profil de vitesse $|\vec{u}|$ en utilisant la CGM avec un angle de contact de 90° . Le domaine spatial discrétré est de : $(nx \times ny) = (100 \times 30)$. L'amplitude est de grandeur de 10^{-4}

La Figure 5.6 montre qu'il existe de petites valeurs d'amplitude de vitesse, de grandeur de 10^{-4} . Pour le modèle de **CGM I**, les valeurs les plus élevées sont présentes dans les points de triple contact, avec une valeur maximale de 1.5454×10^{-4} , alors que le modèle **CGM II** des valeurs élevées le long de l'interface, avec une valeur correspondante de 1.219×10^{-4} .

De plus, le modèle **CGM II** fournit une forme plus “lisse” des courants parasites. Cette forme suit l'emplacement et la courbure de l'interface. Ceci pourrait s'expliquer par l'évaluation du Laplacien du gradient de couleur $\nabla^2\varphi$ du **CGM II**. Ce terme est tenu en compte dans les étapes LBM multiphasiques.

Ensuite, des simulations avec différents angles de contact sont réalisées. Quatre résultats sélectionnés sans perte de généralité de surface mouillante et non mouillante, sont présentés dans la Figure 5.7. Le Tableau 5.2 montre les résultats en termes d'angle de contact mesuré obtenus pour les deux modèles avec un rapport de masses volumiques de 1.

TABLEAU 5.2 Résultats de l'angle de contact avec la CGM en utilisant le modèle de mouillabilité avec un maillage grossier et un rapport de masses volumiques unitaire

$\theta^\circ_{\text{attendu}}$	$\theta^\circ_{\text{CGM I}}$	$\theta^\circ_{\text{CGM II}}$
30.1370	-	30.1370
45.2400	45.8868	45.1466
59.4900	60.5351	59.7263
90.0000	89.9219	89.8791
120.7911	119.7442	120.5654
150.8516	147.6023	148.7155

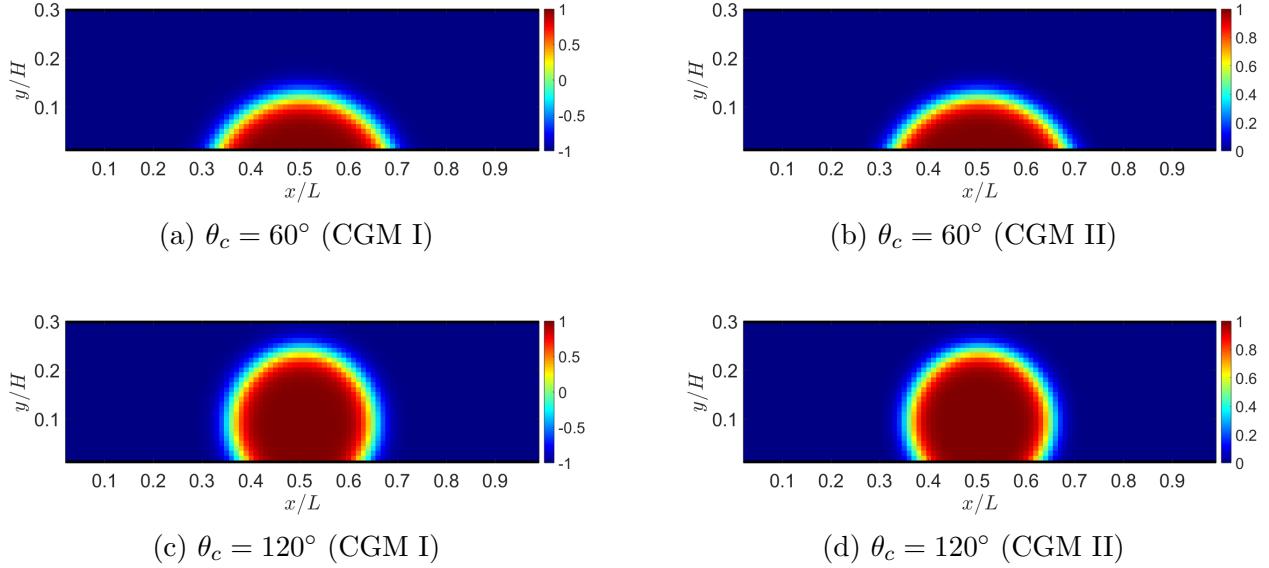


FIGURE 5.7 Profils finaux des champs de couleur φ_I et φ_{II} pour un angle de contact mouillant (60°) et non mouillant (120°) avec un rapport de masses volumiques unitaire

Les résultats de cette section montrent que le modèle de mouillabilité est globalement capable de récupérer les angles de contact imposés. Obtenir exactement une valeur égale à l'angle de contact attendu revient à ce que l'interface à l'état stationnaire repose exactement sur un nœud du domaine spatial discrétré.

Dans le modèle **CGM I**, le scénario où l'angle de contact est à 30° n'est pas bien traité par ce modèle dans cet exemple. En effet, la gouttelette se déforme, puis une partie se translate horizontalement sous l'effet des conditions périodiques. Il est déduit que la résolution du maillage n'est pas suffisante pour **CGM I** à des surfaces très mouillantes. Ceci n'est pas le cas pour le modèle **CGM II**.

Il est à noter que l'approche suivie pour le calcul de l'angle de contact devient très sensible lorsque l'angle de contact est élevé. En outre, les dimensions H_h^0 et b^0 doivent être soigneusement choisies. Pour la CGM et une surface non mouillante forte, à un maillage grossier, la gouttelette risque de se déplacer vers la frontière horizontale opposée du domaine, surtout si la hauteur de la gouttelette est importante. Ceci est le cas pour les deux modèles CGM à un angle de 150° . Par exemple, pour une forme géométrique de gouttelette définie par $(H_h, b) = (25, 13)$, la gouttelette se déplacera à la frontière $y = 0.3$. L'exemple simulé ne correspond alors pas à la solution analytique recherchée.

Dans l'ensemble, malgré ces points, le modèle **CGM II** a été capable de simuler les six scénarios et a donné légèrement de meilleurs résultats que **CGM I**, en termes d'exactitude

de l'angle de contact final, en particulier pour les surfaces mouillantes. Ceci s'explique par les termes présents dans ce modèle **CGM II** qui définissent la courbure de l'interface, aidant à maintenir son intégrité pour des courants parasites plus faibles, et conservent donc probablement mieux l'angle de contact prescrit. Cette première simulation avec le modèle de mouillabilité implémenté a été alors vérifiée en termes de précision des angles de contact finaux, même avec un maillage grossier. Enfin, comme attendu, il a été déduit que le choix des dimensions de la gouttelette est important, et doit être adapté au maillage choisi. Un maillage plus fin sera recommandé pour traiter aisément les cas de surface non mouillante, en permettant d'augmenter le nombre de noeuds définissant la gouttelette.

5.4.2 Haut rapport de masses volumiques

Les simulations de rapports de masses volumiques élevés sont mentionnées dans de nombreux travaux multiphasiques comme un défi pour les modèles multiphasiques LBM. Elles peuvent être à l'origine de résultats inexacts, voire d'une stabilité médiocre. Pour les présentes simulations, dans le cas d'une simulation à 30° avec un rapport de masses volumiques de 1000, le nombre de pas de temps est de 969000, alors qu'il n'a fallu que 700000 pas de temps pour le cas à 90° avec le même rapport de masses volumiques, pour le modèle **CGM II** (afin de respecter le critère de différence de tolérance). En outre, il convient de souligner que, compte tenu de l'analyse de la section précédente 5.4.1, la taille du maillage est modifiée à $(nx \times ny) = (300 \times 100)$, et les dimensions des gouttelettes sont ajustées en conséquence. Dans cette partie du travail, le but principal est de vérifier si chacun des deux modèles est capable de simuler des rapports de masses volumiques élevés de 10 à 1000 (avec un rapport de viscosités cinématiques unitaire).

Les résultats finaux de l'angle de contact sont fournis dans le Tableau 5.3. Une étude supplémentaire a été réalisée sur la magnitude de la vitesse. Comme dans la discussion précédente, les valeurs de vitesse les plus élevées se trouvent près de l'interface ou à son niveau pour les cas de rapport de masses volumiques de 100. Si les modèles **CGM I** et **CGM II** sont comparés pour une surface mouillante, l'amplitude maximale respective des valeurs de vitesse est de 3.2235×10^{-4} et de 9.4366×10^{-6} . Pour le scénario sans mouillage, les valeurs respectives sont de 2.6225×10^{-4} et 9.1271×10^{-6} . Par conséquent, l'ampleur de la vitesse est peu affectée par l'angle de contact en termes de grandeur de valeurs (10^{-4} pour **CGM I** et 10^{-6} pour **CGM II**). Il est plutôt influencé par le modèle employé, donnant un avantage au modèle **CGM II**, où les courants parasites sont plus faibles.

Quelques observations sont à annoncer. Globalement, les angles de contact imposés sont recouverts par le modèle de mouillabilité. Les valeurs résultantes semblent être moins exactes

TABLEAU 5.3 Angles de contact finaux pour les cas de mouillage et de non mouillage, en faisant varier le rapport λ . Le nombre de pas de temps nt pour chaque cas est également indiqué pour les deux modèles CGM. Le maillage est de taille ($nx \times ny$) = (300 × 100)

λ	θ_{attendu}	$\theta_{\text{CGM I}}$	$\theta_{\text{CGM II}}$	nt
10		29.0003	29.5935	8×10^5
100	30.1370	30.0756	29.6053	1.5×10^6
1000		33.9816	30.1370	2×10^6
10		46.9180	45.5648	8×10^5
100	45.2397	45.9275	45.0669	5×10^5
1000		47.2588	45.3318	2×10^6
10		61.3013	59.9633	8×10^5
100	59.4898	59.9072	59.2987	5×10^5
1000		60.8516	59.7039	2×10^6
10		89.9557	90.0003	8×10^5
100	90.0000	89.9109	89.9949	5×10^5
1000		89.8488	89.9893	1×10^6
10		121.0482	120.7911	8×10^5
100	120.7911	121.5023	120.7911	5×10^5
1000		121.8908	120.7911	2×10^6
10		150.4065	153.5190	8×10^5
100	150.8516	150.9997	153.5190	5×10^5
1000		151.9275	-	1×10^6

à haut rapport qu'à faible rapport de masses volumiques pour le modèle **CGM I**, à l'exception du cas $\theta_c = 60^\circ$. Pour le cas spécifique d'un angle de contact imposé autour de 150° , pour le rapport λ de 1000, le modèle **CGM II** devient instable après 4000 pas de temps. L'angle de contact a été mesuré pour les premiers pas de temps, et il s'est avéré adéquat. Cependant, le modèle diverge par la suite. Une étude plus approfondie a permis de déduire que la boucle vitesse-pression ne converge pas dans ce cas. Une autre explication possible est la présence d'un gradient de champ de couleur très élevé dans une direction. Par conséquent, le modèle peut avoir des difficultés à capturer ce gradient. En effet, pour le modèle **CGM II** et pour les surfaces non mouillantes très élevées, par exemple $\theta_c = 150^\circ$, la masse volumique et le profil de l'interface commencent à se détacher de la frontière solide à un rapport de masses volumiques important, soit de 1000 dans le cas présent. Finalement, il est conclu que les résultats issus du modèle **CGM II** sont généralement peu influencés par le rapport de masses volumiques.

Pour résoudre l'enjeu du **CGM II** avec la masse volumique élevée de 1000, un maillage légèrement plus raffiné de (400 × 200) est utilisé. En outre, la largeur de l'interface T est modifiée à 7 ($\beta \approx 0.2857$). Les différentes simulations réalisées ont montré que la valeur minimale de la largeur pour préserver la stabilité du modèle est $T = 6$ ($\beta \approx 0.3333$). Les résultats sont dé-

duits plus exacts. En particulier, pour le cas de la surface non mouillante, la valeur finale est $\theta_c = 157.0796^\circ$, pour un angle attendu de $\theta_c = 157.5126^\circ$. Par ailleurs, un angle $\theta_c = 30.9066^\circ$ est mesuré par interpolation linéaire pour un angle attendu de $\theta_c = 30.9897^\circ$.

5.4.3 Raffinement de maillage et étude de convergence

Après avoir réalisé des simulations avec des rapports de masses volumiques élevés, il est proposé de passer à une étude de raffinement, où différentes tailles de maillage sont adoptées. Sauf indication contraire, le paramètre par défaut β^* pour le maillage grossier est 0.4, soit $T = 5$. Ce choix s'explique par la volonté de garder l'interface la plus fine possible sans perte de stabilité. En revanche, une interface trop épaisse avec peu de noeuds n'est pas optimale, ou du moins pas compatible avec les modèles CGM développés. La largeur de l'interface fait l'objet d'un traitement particulier, affinée relativement au maillage avec son raffinement. Mathématiquement, l'expression 4.26 telle que réalisée dans [38], est utilisée pour un temps positif. La variable d'intérêt calculée lors du raffinement est l'erreur de masse Em , expliquée en premier. Une étude de sensibilité sur la variable η est ensuite réalisée, avant d'estimer l'ordre de convergence pour deux cas de simulation à rapports différents.

Calcul de l'erreur de masse

Pour la précision de la convergence, l'erreur Em utilisée est une erreur de masse basée sur la solution analytique, qui a été proposée dans [44] :

$$Em = \sqrt{\left(\frac{m_{out}^h}{m_{tot}^h}\right)^2 + \left(\frac{m_{in}^l}{m_{tot}^l}\right)^2} \quad (5.11)$$

Cette quantité Em permet d'évaluer la masse du fluide h présent en dehors de sa région analytiquement attendue m_{out}^h , c'est-à-dire à l'extérieur de la gouttelette, et la masse du fluide l située à l'intérieur de sa région inattendue m_{in}^l . La masse inattendue de chaque fluide est comparée à sa masse totale m_{tot}^h et m_{tot}^l . La Figure 5.8 illustre les masses m_{out}^h et m_{in}^l . Les valeurs de masse sont considérées comme égales aux valeurs de masse volumique, étant donné que le volume autour d'un site du réseau de calcul est de 1.

Choix de la valeur de la puissance η La variable η est utilisée pour contrôler l'intensité de la puissance et réduire la valeur du reconstructeur d'interface. Plus sa valeur est petite, plus l'interface est fine. Avec une valeur de $\eta = 1.0$, il est attendu que l'interface devienne très épaisse au niveau du maillage le plus raffiné, qu'une partie de la masse de la gouttelette soit

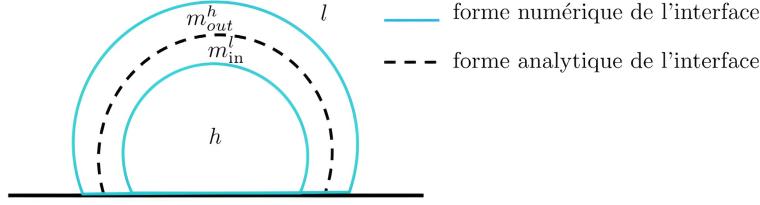


FIGURE 5.8 Schéma descriptif des quantités de masse situées dans les régions inattendues

perdue et que de petites parties se déplacent ailleurs dans le domaine. Cette valeur n'est donc pas retenue. La précision de l'angle de contact final est faiblement influencée par la valeur de η . L'influence de l'angle de contact θ_c sur les résultats est plus grande. D'autre part, la condition $\eta = 0$ signifie en particulier que l'épaisseur de l'interface est gardée constante même avec un maillage plus fin, ce qui éloigne la solution raffinée de la solution analytique en termes de proportion. En assurant une interface suffisamment fine, la valeur de $\eta = 0.5$ est choisie, étant un bon compromis entre la minimisation des courants parasites et l'erreur Em .

Cas 1 : $\lambda = 1$ et $\nu_h/\nu_l = 1$

Sans perte de généralité, les simulations avec 45° sont omises puisqu'un angle de 30° est étudié et 30° est plus difficile à simuler. Le champ de couleur final pour deux types de surface est présenté dans la Figures 5.9 en utilisant le maillage fin de $nx = 800$. Les angles de contact

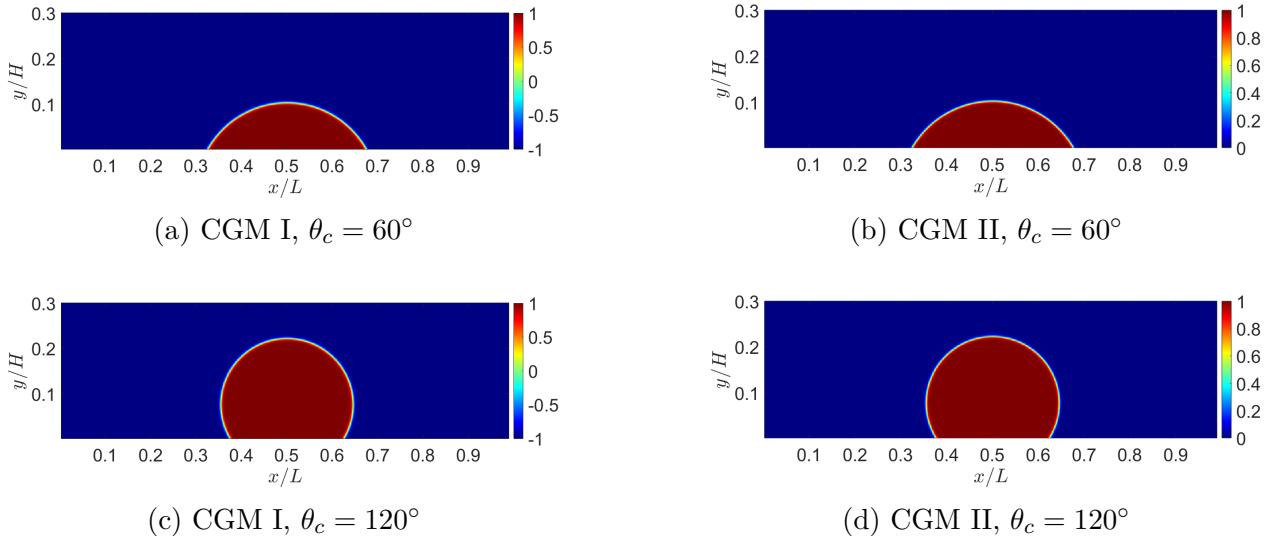


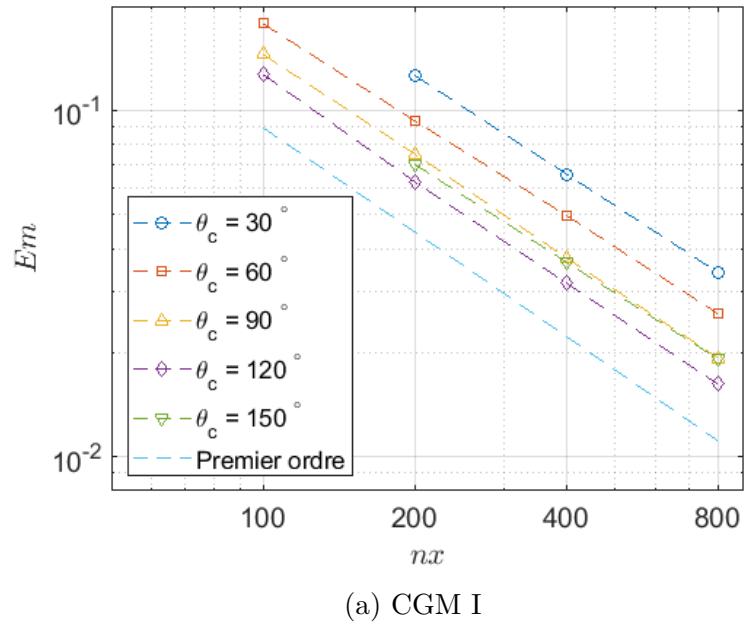
FIGURE 5.9 Tracés finaux du champ de couleur φ_I et φ_{II} pour la taille de maille la plus raffinée ($nx = 800$), pour deux angles de contact ($\theta = 60^\circ$ et 120°), et un raffinement d'interface $\eta = 0.5$

sont correctement saisis, ce qui est confirmé par le Tableau 5.4. Ce dernier montre également que les courants parasites se manifestent généralement moins à mesure que le maillage est raffiné. Ceci est dû au point qu'avoir plus de noeuds à l'interface et au point de contact triple permet de mieux estimer les variables d'étude à ces endroits.

TABLEAU 5.4 Résultats des simulations de raffinement avec $\eta = 0.5$, présentant les angles de contact mesurés et l'amplitude de la vitesse maximale. Le rapport de masses volumiques est de 1. Le nombre correspondant pour le maillage raffiné est fixé de manière à satisfaire la condition suivante : $nx = 2 \cdot nx^* \implies \Delta t = 4 \cdot \Delta t^*$

nx	$\theta_{\text{attendu}}^\circ$	$\theta_{\text{CGMI}}^\circ$	$\theta_{\text{CGMII}}^\circ$	$ \vec{u}_{\text{I}} _{\max}$	$ \vec{u}_{\text{II}} _{\max}$
100	30.1370	-	30.1370	-	2.97×10^{-4}
200		29.1484	29.0689	1.02×10^{-3}	2.44×10^{-4}
400		29.9334	29.3289	6.33×10^{-4}	2.20×10^{-4}
800		30.8443	28.8272	4.60×10^{-4}	2.06×10^{-4}
100	59.4898	59.4900	60.5351	9.13×10^{-4}	2.16×10^{-4}
200		59.8630	61.9275	7.12×10^{-4}	1.16×10^{-4}
400		59.6711	60.7162	7.33×10^{-4}	8.37×10^{-5}
800		60.2026	60.1049	7.30×10^{-4}	7.57×10^{-5}
100	90	89.9219	89.8791	7.55×10^{-4}	2.77×10^{-4}
200		90.8784	89.9856	7.97×10^{-4}	1.39×10^{-4}
400		90.9470	90.0040	8.23×10^{-4}	9.25×10^{-5}
800		90.2372	90.0048	8.37×10^{-4}	3.24×10^{-4}
100	120.7911	120.7911	119.7442	1.01×10^{-3}	2.63×10^{-4}
200		121.6648	121.8908	7.08×10^{-4}	1.32×10^{-4}
400		121.2220	121.3456	7.19×10^{-4}	8.34×10^{-5}
800		121.0051	121.0696	7.43×10^{-4}	7.12×10^{-5}
100	150.8516	-	-	-	-
200		151.9275	153.5190	1.79×10^{-3}	2.19×10^{-4}
400		150.2828	152.1946	1.10×10^{-3}	1.50×10^{-4}
800		149.3422	152.7298	8.01×10^{-4}	1.47×10^{-4}

Enfin, en utilisant l'équation 5.11 de l'erreur, un graphique de convergence est tracé pour les deux CGM, présenté dans la Figure 5.10. Comme attendu, l'erreur devient plus petite à mesure que le maillage est raffiné. Il est déduit que les modèles sont globalement d'ordre 1, ce qui est adéquat et montre un bon comportement de l'erreur de masse Em avec les raffinements.



(a) CGM I

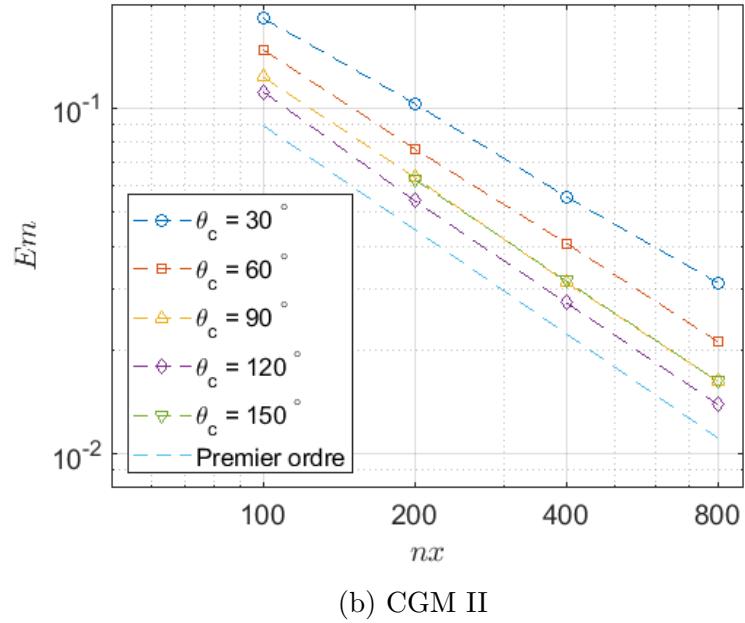


FIGURE 5.10 Graphique logarithmique de l'erreur Em en fonction de la taille des maillages pour **CGM I** et **CGM II**, pour les valeurs suivantes 30° , 60° , 90° , 120° , et 150° . Le rapport de masses volumiques est de 1

Cas 2 : $\lambda = 1000$ et $\nu_h/\nu_l = 100$

En adoptant toujours les deux modèles **CGM I** et **CGM II**, une étude de raffinement est réalisée avec un cas de rapport de masses volumiques $\lambda = 1000$ et un rapport de viscosités cinématiques $\nu_h/\nu_l = 100$. Il a été déduit qu'un temps significatif est nécessaire pour atteindre l'état d'équilibre, comparé aux simulations précédentes. La raison principale est la présence d'un rapport de masses volumiques en plus d'un rapport de viscosités cinématiques élevés. Ce dernier était de 1 auparavant. Concernant l'épaisseur d'interface, le reconstructeur par défaut β^* pour le maillage grossier est $2/7$, soit $T = 7$. La solution initiale correspondante à ce maillage est une demi-gouttelette avec les dimensions suivantes : $H_h^0 = 25$ et $b = 50$. De même, il est proposé d'imposer un angle de contact d'environ 30° , 90° et 150° pour vérifier la capacité des deux modèles CGM à réaliser différents types de surfaces à partir d'une surface neutre, avec des propriétés entre les phases significativement différentes.

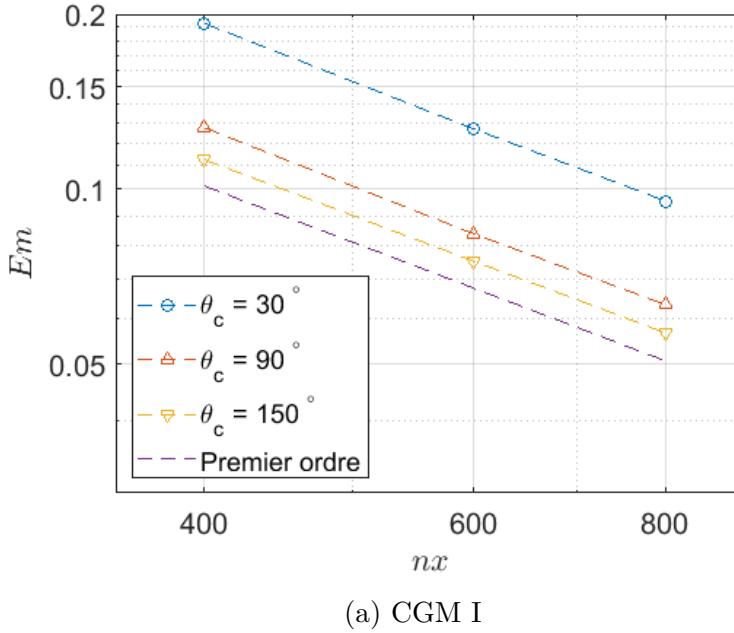
Les résultats de convergence de l'erreur Em sont présentés dans les Figures 5.11a et 5.11b. Il est constaté que les erreurs Em de **CGM II** sont globalement plus petites que les erreurs de **CGM I** pour le même angle de contact θ_c . L'ordre de convergence constaté est d'environ 1. Similairement au cas précédent, les erreurs sont plus élevées pour les cas de $\theta_c = 30^\circ$. Le critère d'arrêt n'empêche pas l'apparition du régime asymptotique de convergence à l'ordre 1.

Deux éléments additionnels sont jugés importants à mentionner. Premièrement, il est à noter que l'article de Subhedar [42] présente seulement des cas de rapport de 100 pour la viscosité dynamique et non cinématique. Deuxièmement, la relaxation MRT serait probablement bénéfique pour faciliter le traitement des cas à rapports de viscosités cinématiques très élevés (100 et plus). Il faut effectuer un choix adéquat des dimensions de la gouttelette et de la taille du maillage étudié, lors de la simulation des rapports élevés de masse volumique et de viscosité cinématique pour assurer la stabilité numérique, surtout si le type de relaxation SRT est utilisé.

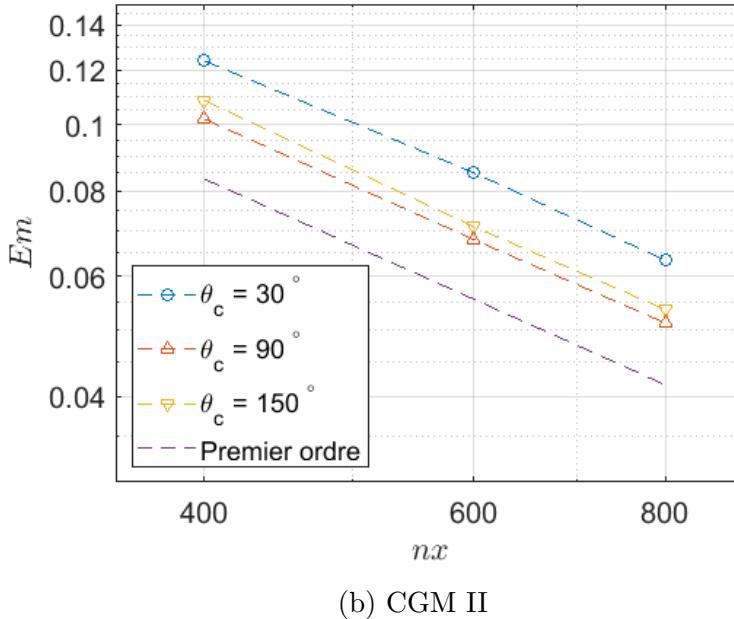
Enfin, les valeurs maximales de la magnitude de vitesse sont investiguées pour chacun des maillages $nx = 400$ et $nx = 800$. Les résultats fournis dans la Tableau 5.5 montrent un avantage pour le modèle **CGM II**, ayant des courants parasites plus faibles à haut rapport de masses volumiques. Le raffinement de maillage aide à réduire les courants parasites également.

TABLEAU 5.5 Magnitude maximale de la vitesse $|\vec{u}|_{\max}$ pour tous les angles de contact simulés, concernant les maillages $nx = 400$ et $nx = 800$

nx	CGM I	CGM II
400	5.91×10^{-3}	3.53×10^{-4}
800	3.35×10^{-3}	1.75×10^{-4}



(a) CGM I



(b) CGM II

FIGURE 5.11 Graphique logarithmique de l'erreur Em en fonction de la taille des maillages pour CGM I et CGM II, pour les valeurs suivantes 30° , 90° , et 150° . Le rapport de masses volumiques est de 1000. Le rapport de viscosités cinématiques est de 100

CHAPITRE 6 IMPACT DE GOUTTELETTE SUR UNE SURFACE SOLIDE

Le travail mené jusqu'à ce point permet de modéliser, de manière préliminaire, l'impact bidimensionnel d'une gouttelette sur une surface plane. Le type d'études effectuées dans ce chapitre vise, tout d'abord, à effectuer une comparaison code-à-code entre les deux modèles **CGM I** et **CGM II**, en notant les similitudes et les différences existantes pour un cas dynamique d'impact de gouttelettes. La partie suivante s'inspire des travaux de Gupta et Kumar [4], où une analyse de l'impact des gouttelettes a été menée dans un domaine bidimensionnel. Ce travail étudiera la capacité de la relaxation de type SRT mise en œuvre dans les modèles CGM pour modéliser un cas dynamique d'impact. Les simulations préliminaires effectuées dans ce travail sont plutôt qualitatives et montreront la capacité des deux modèles CGM à reproduire le phénomène d'impact en deux dimensions, sur une surface solide, plane et sèche, et dans un contexte isotherme. En outre, pour une étude rigoureuse, des modèles tridimensionnels seront nécessaires dans le futur puisque la physique de l'impact des gouttelettes est en trois dimensions.

Les sections sont alors divisées comme suit : D'abord, le cas test général de ce chapitre est décrit. Par la suite, la méthodologie poursuivie est présentée, en particulier en ce qui concerne la définition des paramètres d'entrée et le travail du post-traitement. De plus, des résultats préliminaires sont exposés pour la vérification code-à-code. En particulier, une partie du travail est consacrée à la vérification de la conservation de la masse dans ce cas. Une dernière partie du travail axée sur la simulation d'un ratio de masse volumique élevé, conduisant à la génération d'un nombre de Weber relativement élevé, est discutée. Des comparaisons avec des données de la littérature sont effectuées.

6.1 Impact de gouttelette en 2D

Le cas de test étudié est un cas 2D, qui peut être visualisé dans la Figure 6.1. La hauteur du domaine est H . Une gouttelette, caractérisée par une masse volumique élevée h et un diamètre initial $D = H/8$, est placée à la position $(x, y) = (0.5H, 0.75H)$ dans un domaine rectangulaire. La longueur est posée égale à la hauteur H . La phase ayant la plus faible masse volumique l occupe le reste du domaine rectangulaire (nx, ny).

Initialement, la gouttelette est stabilisée pendant un certain nombre de pas de temps n , afin de dissiper au maximum les courants parasites initiaux, d'assurer l'équilibre initial de la solution où la différence de pression à l'intérieur et à l'extérieur de la gouttelette respecte la

loi de Laplace, et de maintenir une forme d'interface adéquate. La solution obtenue après ce processus de lissage est définie comme la “solution initiale équilibrée”. Dans le contexte de ce travail, l'évaluation des courants parasites a permis de déduire qu'un nombre de pas de temps de $n = 10000$ est suffisant pour un maillage assez raffiné (par exemple $nx = ny = 801$). Ce nombre de pas de temps est donc largement suffisant pour des maillages plus grossiers. Cela reproduit le cas test de Laplace de la gouttelette stationnaire, qui a été étudié précédemment dans le Chapitre 4.

Ensuite, un champ de gravité externe $(\vec{g})_y$ est appliqué afin d'accélérer la gouttelette, c'est-à-dire la force volumique numérique \vec{F}_b des deux modèles CGM. Pour obtenir une valeur de vitesse suffisamment élevée, la gouttelette sera placée dans la moitié supérieure du domaine au temps initial : $y = 0.75H$. Quant aux conditions aux limites, elles sont fixées de manière à modéliser les limites solides supérieure et inférieure, tandis que les conditions aux limites gauche et droite sont périodiques. Le fluide h ne doit avoir qu'un déplacement vertical avant le contact avec la paroi solide inférieure.

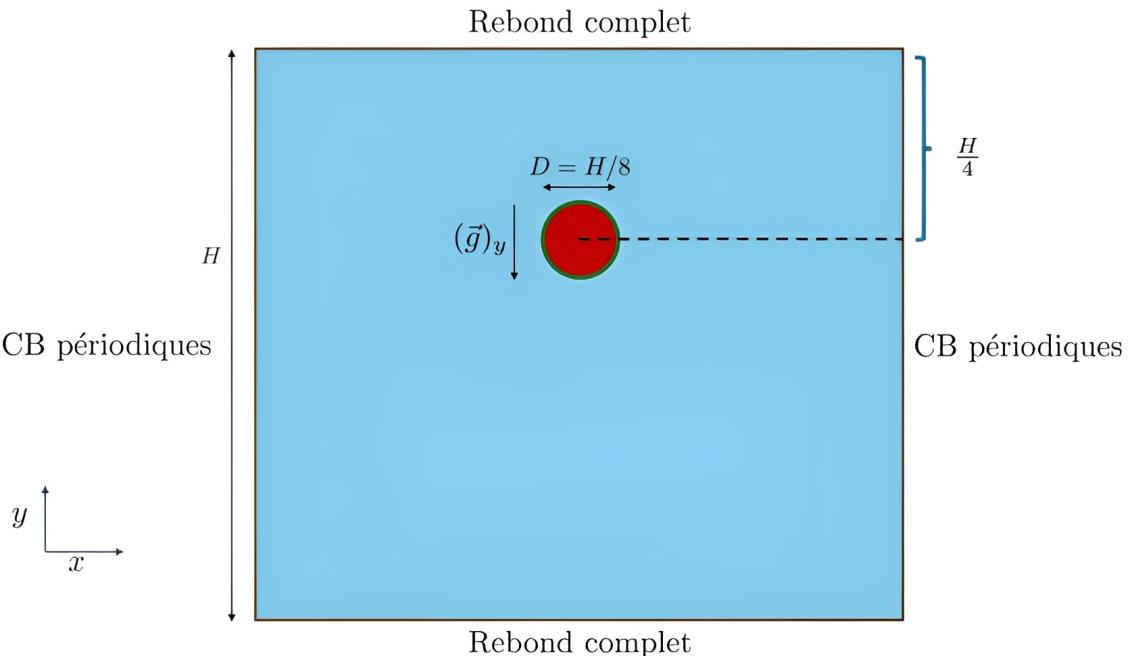


FIGURE 6.1 Illustration descriptive du cas test d'impact de gouttelette en 2D. Le champ de gravité est appliqué après un certain temps. La gouttelette est supposée circulaire au moment initial, avec le diamètre initial $D = H/8$. Des conditions de bord périodiques (CB) sont appliquées le long de la direction x . Des conditions aux limites de rebond complet sont appliquées aux limites horizontales supérieures et inférieures

6.2 Méthodologie d'investigation numérique

Les nombres adimensionnels de Weber, Reynolds, Bond et Ohnesorge, le rapport de masses volumiques et le rapport de viscosités cinématiques, ainsi que l'angle de contact sont utilisés pour caractériser l'écoulement du fluide impliquant l'impact dynamique de la gouttelette. L'étude de groupe π montre que cet écoulement dépend du nombre de Weber, Reynolds, Bond, le rapport de masses volumiques et de viscosités cinématiques. De plus, l'angle de contact est considéré dans les conditions de mouillabilité. Il est connu que le nombre d'Ohnesorge dépend du nombre de Weber We et du nombre de Reynolds Re . En effet, deux simulations numériques différentes peuvent avoir des variables indépendantes différentes (notamment la tension interfaciale, les propriétés de masse volumique et de viscosité cinématique, et la magnitude de la force de gravité), mais les mêmes nombres sans dimension. Cela montre qu'il existe un nombre infini de solutions pour la même caractérisation de ce type d'écoulement du problème d'impact de gouttelette.

Il convient de noter que le nombre d'Ohnesorge Oh de l'équation 1.2 est indépendant de la vitesse d'impact V et peut être fixé initialement selon les besoins, de la même manière que le nombre de Bond Bo . Ils dépendront des variables d'entrée LBM. Ainsi, le travail effectué a cherché à cibler des nombres adimensionnels fixes, en faisant varier librement les variables indépendantes en unités LBM : la masse volumique de la gouttelette ρ_h , sa viscosité cinématique ν_h , la magnitude de la force de gravité $|(\vec{g})_y|$, et la tension interfaciale σ .

Par ailleurs, un défi rencontré est l'évaluation de la vitesse caractéristique de l'étude, c'est-à-dire la vitesse d'impact V , qui n'est pas connue *a priori* au début de la simulation. La vitesse d'impact V permettra de calculer les nombres adimensionnels de Weber et de Reynolds à l'aide de l'équation 1.1. Il est important de noter que les expériences physiques sont réalisées dans le but principal de mesurer cette quantité. Des exécutions numériques consécutives sont effectuées pour atteindre une vitesse d'impact fixe V . Le défi supplémentaire consiste à faire correspondre cette vitesse aux nombres adimensionnels étudiés.

La procédure suivie dans ce travail pour définir les paramètres initiaux des simulations envisagées est résumée dans la Figure 6.2. Il est à mentionner que les simulations sont effectuées en tenant compte des deux modèles CGM, pour autant qu'ils fournissent des simulations stables et que les résultats soient cohérents. Il est donc possible de procéder à une vérification code-à-code. En outre, les valeurs de masse sont observées pendant l'exécution de la simulation pour différents pas de temps afin de s'assurer qu'elles sont constantes ou, en d'autres termes, qu'elles respectent la conservation de la masse.

Lors du post-traitement, la vitesse d'impact, le facteur d'étalement et le temps adimensionnel

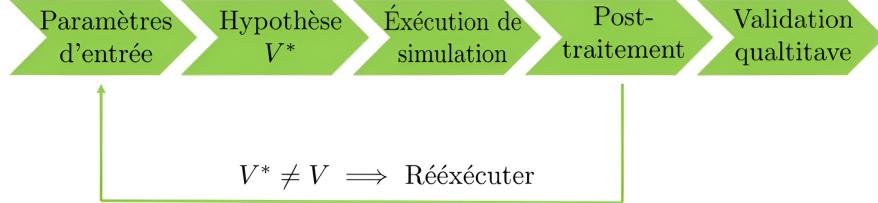


FIGURE 6.2 Brève description de la procédure utilisée pour définir les variables indépendantes pour un cas donné, en fonction des nombres adimensionnels de Reynolds et de Weber requis. La différence entre la vitesse V^* de l'hypothèse et la vitesse V de la simulation doit être faible. Les résultats sont ensuite étudiés qualitativement avant que des mesures quantitatives ne soient effectuées, pour des vérifications code-à-code ou des comparaisons avec la littérature

d'impact sont calculés ainsi :

- La vitesse de la gouttelette $|\overline{(\vec{u})_y}|$ en fonction du temps doit être évaluée. Pour ce faire, la position de la gouttelette est déterminée pour un pas de temps donné. L'emplacement de la gouttelette (nœuds définissant la position de la gouttelette) doit respecter la condition $0.0 \leq \varphi_I \leq 1.0$ ou $0.5 \leq \varphi_{II} \leq 1.0$. Après avoir extrait la vitesse locale le long de la deuxième dimension $(\vec{u})_y$ à chaque nœud localisant la gouttelette, une moyenne est appliquée et la valeur résultante est considérée comme la vitesse moyenne de la gouttelette pour un pas de temps donné. Mathématiquement, la vitesse $|\overline{(\vec{u})_y}|$ est donnée par :

$$\overline{|(\vec{u})_y|}_h = \frac{\sum_{j=1}^{nx \cdot ny} |(\vec{u})_y|_{,j}}{Card(D_h)} \quad (6.1)$$

où D_h est l'ensemble des noeuds définissant l'emplacement de la gouttelette comme :

$$D_h = \{j : 0.0 \leq \varphi_I \leq 1.0 \text{ ou } 0.5 \leq \varphi_{II} \leq 1.0\} \subset \{1 \leq j \leq nx \cdot ny\} \quad (6.2)$$

- Le facteur d'étalement \mathcal{B} de l'équation 6.3 est l'une des quantités d'intérêt étudiées.

$$\mathcal{B} = \frac{d}{D} \quad (6.3)$$

où d est le diamètre d'étalement à un moment donné. L'évolution du facteur d'étalement \mathcal{B} au cours du temps révélera les périodes qui définissent le comportement de la forme de la gouttelette juste après l'impact. Pour rappel, ces quatre moments discutés précédemment dans la revue de littérature et présentés dans la Figure 2.2 sont : la période cinématique, l'étalement, la relaxation, puis l'équilibre. Des investigations

seront menées pour tester si les modèles numériques du laboratoire de recherche sont capables de reproduire certains des quatre moments trouvés dans l'évolution du facteur d'étalement \mathcal{B} .

- Le temps d'impact est considéré comme atteint lorsque la gouttelette arrive à la région inférieure du domaine et voit sa vitesse diminuer de manière significative. Le temps d'impact t_{imp} est défini comme le pas de temps en unités LBM, lorsque la gouttelette est détectée au-dessus de la paroi solide inférieure. Le test de détection pour savoir si la gouttelette est située dans la partie inférieure du domaine est effectué à chaque pas de temps. Essentiellement, le temps d'impact est calculé lorsque la gouttelette est entrée en contact avec la limite inférieure du solide, où les conditions limites de mouillabilité commenceront à prendre effet.

Quelques éléments pour le présent travail sont à mentionner. Il est à noter que le temps d'étude des simulations doit être suffisamment long pour capturer la phase d'équilibre.

En outre, le profil du champ de vitesse macroscopique est étudié, ainsi que la forme de la gouttelette pendant et après l'impact, et sa position temporelle. Certains des résultats seront présentés ultérieurement.

De plus, il convient de noter que le choix suivant a été effectué : la vitesse d'impact dans cette étude ne correspond pas à la vitesse au moment du contact avec la paroi inférieure ($V \neq V|_{t_{imp}}$), mais plutôt à la vitesse maximale atteinte par la gouttelette avant impact ($V = V|_{\max}$). Ainsi, la gouttelette atteint la vitesse d'impact V avant l'impact. Cette définition est jugée cohérente avec celle utilisée lors des expérimentations, où la vitesse est mesurée de manière macroscopique à partir de l'éjection des gouttelettes.

Par ailleurs, les valeurs en lien avec la mobilité de l'interface utilisées sont $\alpha_l = 4/9$ (**CGM I**), et $M = 0.01$ (**CGM II**). Pour ces simulations instationnaires, le critère de convergence pour les itérations de type point fixe du modèle **CGM II** pour le champ de vitesse \vec{u} et le champ de pression p est défini par : $|\vec{u}| \leq 10^{-10}$ et $|p| \leq 10^{-10}$.

6.3 Comparaison code-à-code

Cette section présente l'étude d'une vérification code-à-code par une comparaison entre **CGM I** et **CGM II**. Une première section montre la méthodologie suivie à cette fin. La section suivante met en évidence certains des principaux résultats d'un test préliminaire avec un rapport de viscosités cinématiques unitaire, avant d'augmenter la viscosité cinématique de la gouttelette, de manière à obtenir un rapport ν_h/ν_l de 100.

6.3.1 Méthodologie de vérification code-à-code

Dans cette section, le but est de simuler un nombre de Weber relativement faible. Les simulations sont effectuées avec différents angles de contact : 50° , 70° , 90° , 110° , et 130° . La raison de faire varier la mouillabilité de la surface est de vérifier que certaines variables, principalement le facteur d'étalement \mathcal{B} qui est calculé après impact, dépendent des propriétés de la surface solide. La vitesse de la gouttelette est calculée à chaque pas de temps, et les résultats sont comparés pour mettre en évidence toute différence visible entre les deux CGM. De plus, des comparaisons sont réalisées pour la masse volumique de la condition initiale (après lissage), et le nombre de *Mach* local maximum à tout les temps.

La valeur maximale du nombre *Mach* ($|\vec{u}|/c_s$) dans l'espace et le temps sera évaluée. Il faut rappeler que l'évaluation de la vitesse du son n'est pas similaire dans les deux CGM. Alors qu'elle est constante dans **CGM II**, elle est calculée à l'aide de paramètres libres dans **CGM I**. Le champ de couleur de **CGM I** est considéré à chaque nœud, et la vitesse du son de chaque phase k est prise en compte.

Les nombres de Weber et de Reynolds souhaités sont fixés et les variables d'entrée de la LBM sont ajustées pour obtenir les valeurs cibles, par le biais d'une vitesse d'impact adéquate. Seules les variables en unités LBM (par exemple, le temps en tant que nombre de pas de temps) sont étudiées dans cette section, ce qui est suffisant à des fins de comparaison.

6.3.2 Résultats de vérification code-à-code

Deux groupes de simulations sont exécutées. Le premier est un cas test préliminaire avec un rapport de viscosités cinématiques unitaire. Le second est un cas test avec un rapport de viscosités cinématiques élevé.

Cas test préliminaire

Le but de la première simulation est d'initier l'étude du comportement des gouttelettes par le processus d'impact avec un cas simple, selon la modélisation avec chacun des deux modèles CGM. Pour cela, les valeurs suivantes sont considérées : $(\vec{g})_y = 2 \times 10^{-7}$, le rapport de masses volumiques $\lambda = 3.6$ avec $\rho_l = 1$, $\sigma = 0.001$, $D = 50$, puis $nx = ny = 401$. Le rapport de viscosités cinématiques est maintenu égal à 1, où $\nu_h = \nu_l = 0.034$. Le nombre de Bond résultant est de 1.3. La gouttelette est placée en équilibre pour un nombre total de pas de $n\Delta t = 10000$, avant d'appliquer le champ de gravité externe à une vitesse initiale nulle. Le temps LBM de simulation est de $nt = 600000$. L'épaisseur de l'interface est de $T = 5$ ($\beta = 0.4$).

Les nombres adimensionnels étudiés et le nombre de *Mach* local maximal sont présentés dans le Tableau 6.1.

TABLEAU 6.1 Données préliminaires recueillies pour la simulation initiale de CGM I et **CGM II**. Les variables sont indépendantes de l'angle de contact. Le nombre de *Mach* local maximum à tous les pas de temps est également fourni

Variable	We	Re	Oh	V	$Mach_{\max}$
Valeur	1.0376	3.5308	1.8109	2.4009×10^{-3}	0.008762
	0.9893	3.4476	1.8768	2.3444×10^{-3}	0.004486

Des données extraites dans le Tableau 6.1, il peut être déduit qu'il est possible d'obtenir des valeurs de nombres adimensionnels similaires, à partir des mêmes variables LBM d'entrée, principalement la valeur de la force de gravité qui influe directement sur la vitesse des gouttelettes. Cependant, des différences sont observées concernant le nombre *Mach* maximum évalué pendant la simulation pour chaque position, ce qui donne un avantage au **CGM II**, même si l'écoulement peut toujours être considéré comme faiblement compressible, pour les deux cas de simulations CGM.

Pour une vérification supplémentaire, la solution initiale équilibrée (après 10000 pas de temps) de la masse volumique normalisée ρ_h/ρ_h^0 est présentée pour les deux modèles CGM dans la Figure 6.3. Comme prévu, la hauteur initiale de la solution équilibrée pour les deux CGM

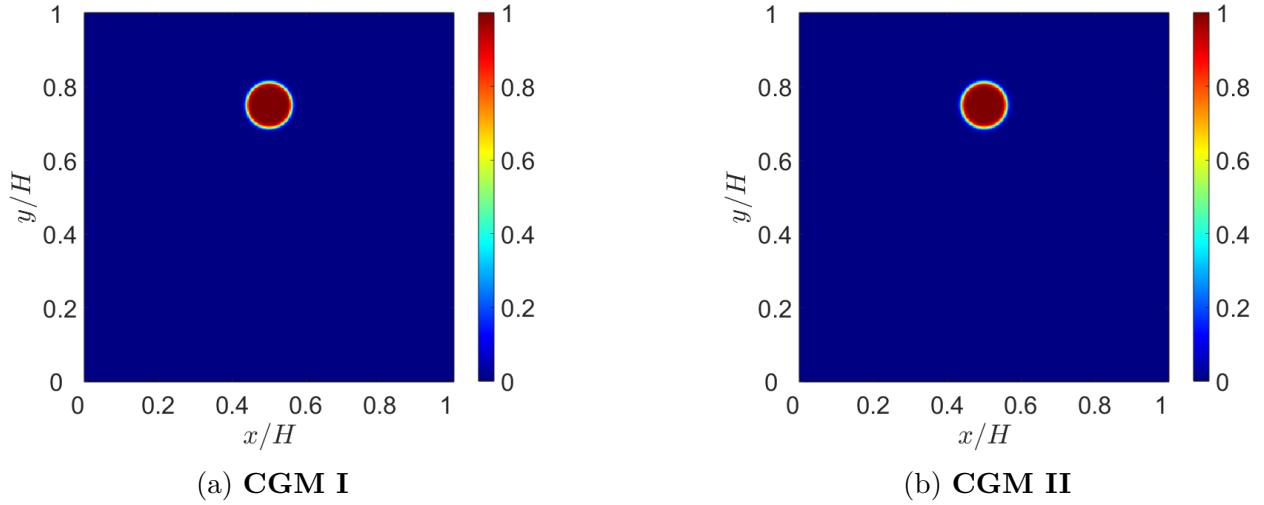


FIGURE 6.3 Tracé de la solution initiale de masse volumique équilibrée de gouttelette ρ_h/ρ_h^0 . Le champ de gravité est appliqué au pas de temps suivant

est située à $y/H = 0.75$, par rapport à la hauteur du domaine. Après l'application de la

force de gravité, la gouttelette tombe et atteint la frontière solide inférieure en même temps pour les deux simulations CGM, à un temps d'impact d'environ $t_{imp} = 157693$. Par la suite, les résultats obtenus pour caractériser l'impact de la présente étude sont présentés dans le Tableau 6.2, par le biais de l'évaluation du facteur d'étalement maximal.

TABLEAU 6.2 Données préliminaires recueillies pour la simulation initiale de CGM I et CGM II. Le facteur d'étalement maximal \mathcal{B}_{max} est évalué

θ_c°	50	70	90	110	130
\mathcal{B}_{max}	2.2463	1.8602	1.5814	1.3514	1.1444
	2.1603	1.8060	1.5141	1.2861	1.2032

Les résultats du Tableau 6.2 montrent tout d'abord un comportement adéquat des gouttelettes après impact. En effet, pour les surfaces mouillantes ($\theta_c < 90^\circ$), le facteur d'étalement maximal \mathcal{B}_{max} est plus élevé que celui d'une surface non mouillante ($\theta_c > 90^\circ$). De plus, même si les valeurs pour un même angle de contact ne sont pas exactement égales pour les deux CGM, les différences de valeurs ne sont pas très importantes. Il faut rappeler que les vitesses d'impact ne sont pas parfaitement identiques pour chaque cas de même angle de contact, et que le traitement de la frontière de mouillage n'est pas similaire entre les deux modèles CGM, lors de l'étape numérique de recoloration.

En outre, l'évolution en fonction du temps du facteur d'étalement \mathcal{B} est étudiée. Les résultats pour une surface mouillante, neutre et non mouillante sont présentés dans la Figure 6.4. Les moments facilement observables à partir de l'évolution de l'étalement dans tous les cas sont celles du mécanisme d'étalement et de l'équilibre. Il est à noter qu'aucune relaxation n'est présente avant la période d'équilibre. Une des raisons est que le rapport de viscosités cinématiques est unitaire : $\nu_h^0/\nu_l^0 = 1$. Une deuxième explication est le faible nombre de Weber. De plus, comme le nombre de Reynolds est faible, les forces dissipatives sont dominantes et les oscillations sont réduites. Dans ce cas, la gouttelette a une énergie minimale qui peut provoquer de faibles oscillations.

Après l'impact, le facteur d'étalement augmente rapidement pendant une courte durée (moment cinématique). La tension interfaciale σ affecte la déformation des gouttelettes. Une faible valeur de σ génère une forte déformation, ce qui conduit à un facteur d'étalement élevé. C'est l'un des principaux facteurs à prendre en compte dans la période cinématique. Comme la même valeur σ est utilisée dans cette simulation, la période cinématique n'est pas affectée par la variation de l'angle de contact θ_c .

Par ailleurs, il est intéressant de visualiser l'évolution temporelle de la vitesse verticale des gouttelettes, en la comparant dans chacun des deux modèles CGM à différents angles de

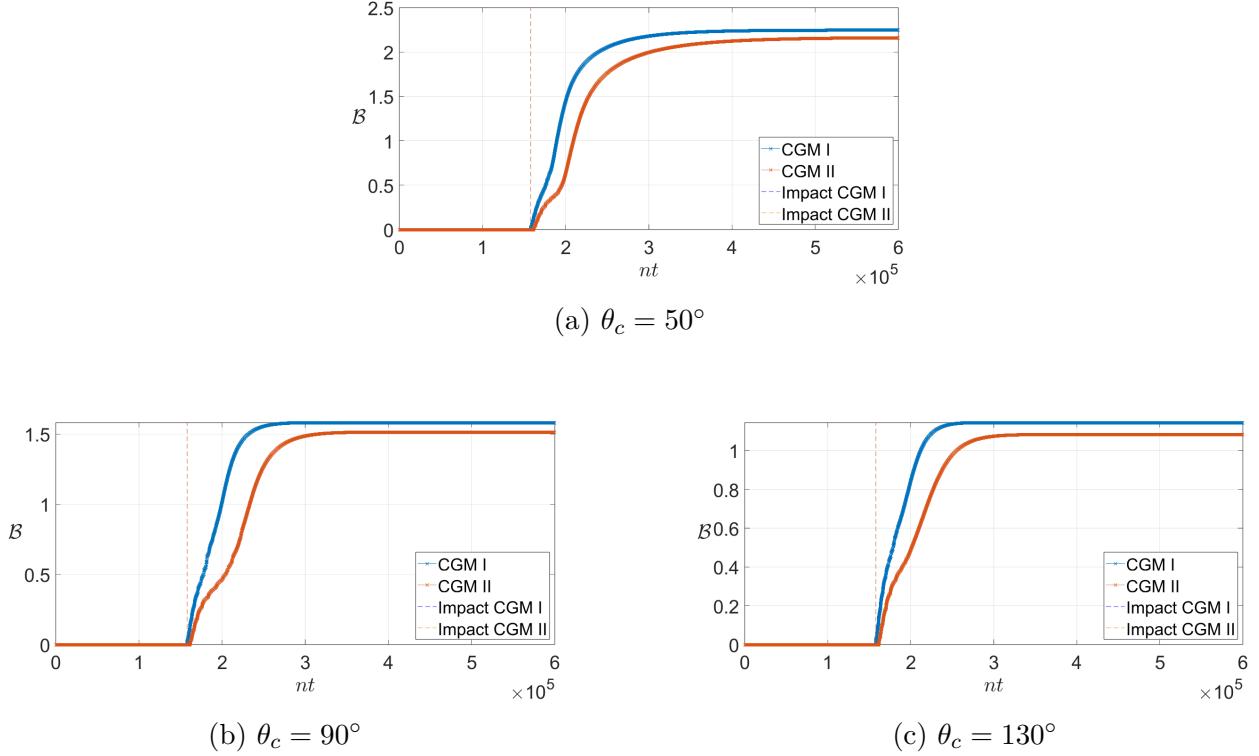


FIGURE 6.4 Évolution du facteur d'étalement \mathcal{B} en fonction des pas de temps LBM. Les deux modèles CGM sont comparés. Le temps d'impact étant similaire, les lignes verticales sont superposées

contact. C'est ce que montre la figure 6.5. Les données recueillies permettent de déduire que la vitesse d'impact est indépendante de l'angle de contact, puisqu'elle est capturée juste avant l'impact : la gouttelette atteint sa vitesse maximale avant ou juste au moment de l'impact, et non après. À la suite de l'impact, l'énergie cinétique est libérée. En outre, il est déduit qu'à faible nombre de Weber, la décélération se produit avant le contact avec la paroi solide. La vitesse est maximale avant impact, puis diminue jusqu'à une valeur très faible, avant d'augmenter à nouveau après impact. Une vitesse constante, égale ou presque égale à 0 est atteinte pendant l'équilibre. L'évolution de la vitesse après impact n'est pas identique entre les deux modèles CGM, car en particulier le traitement de l'interface et la mise en œuvre des conditions de mouillabilité ne sont pas identiques pour les deux modèles CGM.

Enfin, la solution du champ de vitesse pour chaque modèle CGM, juste avant l'impact, est présentée dans la Figure 6.6. Il est à indiquer que la distance verticale entre le point inférieur de la gouttelette et la limite inférieure solide est pratiquement identique dans les deux cas des modèles CGM.

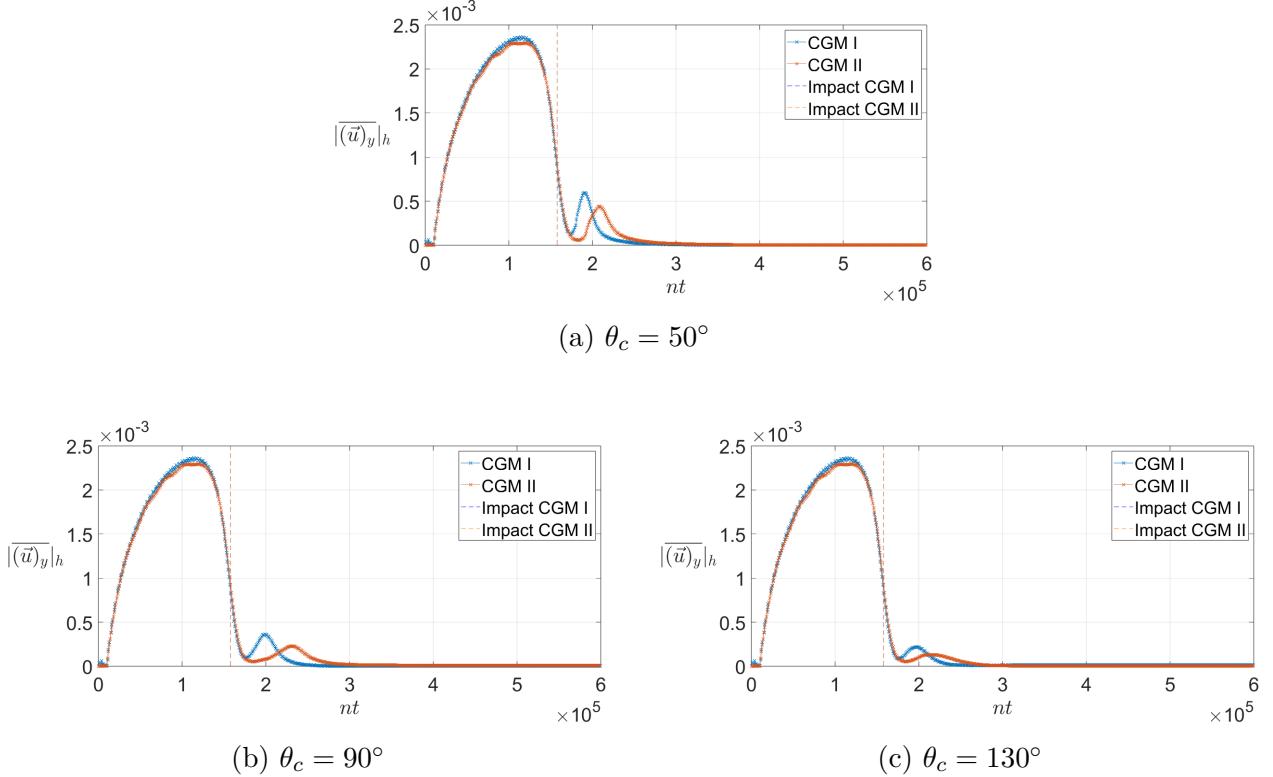


FIGURE 6.5 Évolution de la vitesse des gouttelettes $|\overline{(\vec{u})}_y|_h$ en fonction du temps en unités LBM. Les résultats sont présentés pour toute la durée de la simulation. Les deux modèles CGM sont comparés

Analyse de la conservation de la masse Une brève vérification de la conservation de la masse est réalisée pour ce cas préliminaire. Les résultats de l'annexe E montrent que la masse est préservée lors des simulations.

Il est conclu que les modèles CGM sont fonctionnels et numériquement stables à de faibles nombres de Weber. L'évolution de la vitesse des gouttelettes avant impact est similaire. Le facteur d'étalement de la gouttelette après impact a un comportement similaire entre les deux modèles CGM, ce qui est attendu tant que les nombres de Weber et de Reynolds sont similaires, avec des variables LBM d'entrée de simulation identiques.

Viscosités cinématiques variables

Comme les deux modèles sont capables de gérer différentes valeurs de viscosité cinématique, la deuxième simulation de cette section montre qu'il est possible d'y parvenir pour un cas dynamique, tel qu'un écoulement à deux phases impliquant l'impact de gouttelettes. Les quantités d'entrée sont définies comme suit : $|(\vec{g})_y| = 1 \times 10^{-6}$, $\lambda = 3.6$ avec $\rho_l = 1$, $\nu_h = 0.16$.

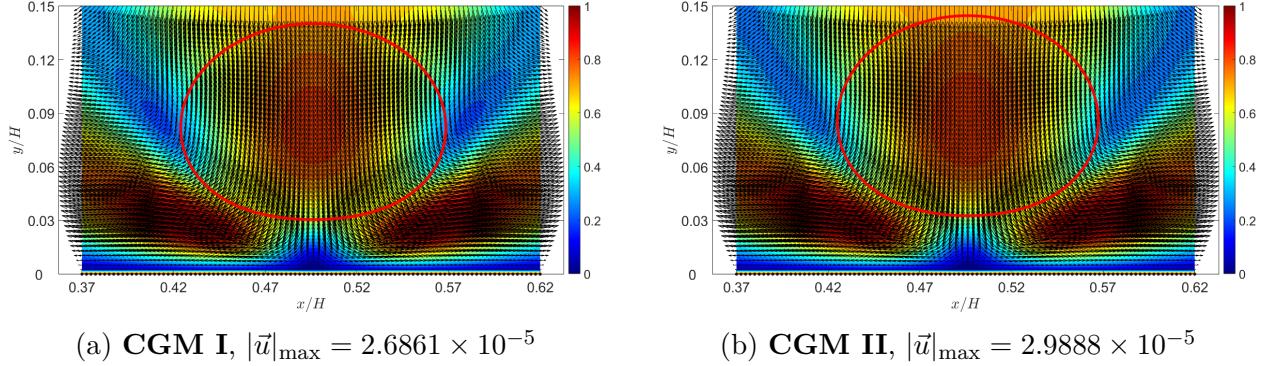


FIGURE 6.6 Tracé de la solution du champ vectoriel de vitesse $\vec{u}(x/H, y/H)$ et de la magnitude (contour) juste avant l'impact, à 157000 pas de temps. La position de l'interface est indiquée en rouge

Le rapport de viscosité cinématique ν_h^0/ν_l^0 est fixé à 100. La tension interfaciale est définie à $\sigma = 0.003$. Par conséquent, le nombre de Bond dans ce cas est : $Bo = 2.17$. La taille du maillage est définie comme $nx = ny = 401$. L'épaisseur de l'interface est $T = 5$, soit $\beta = 0.4$. De plus, le nombre d'Ohnesorge est : $Oh = 0.78$. Le diamètre initial est identique au cas précédent, soit $D = 50$.

Les résultats obtenus pour le facteur d'étalement sont présentés dans la Figure 6.7.

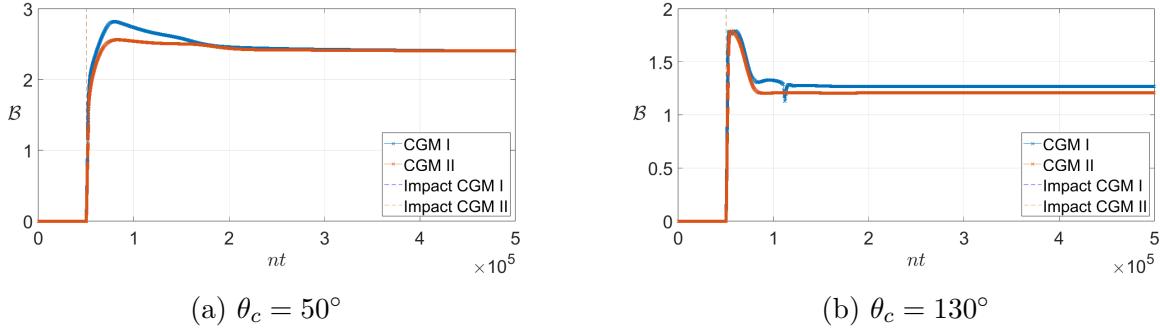


FIGURE 6.7 Évolution du facteur d'étalement \mathcal{B} en fonction du temps LBM. Les deux modèles CGM sont comparés. Le rapport de viscosités cinématiques est de 100. Le temps d'impact est à 50259 pas de temps pour les deux modèles

Les résultats montrent qu'après l'impact, le facteur d'étalement maximal \mathcal{B}_{\max} diffère peu entre les deux modèles CGM pour le même angle de contact. En outre, la plage de valeurs de l'évolution du facteur d'étalement devient de plus en plus différente entre les surfaces mouillantes et non mouillantes si les angles de contact correspondants sont significativement

différents. Ceci est dû au traitement différent des conditions d'interface et de mouillabilité dans chaque modèle CGM. Un angle de contact faible (surface mouillante élevée) implique un \mathcal{B}_{\max} plus élevé.

D'après la figure 6.7 aussi, le facteur d'étalement maximal \mathcal{B}_{\max} est plus élevé pour **CGM I**, ce qui indique que la propriété de mouillage a un effet plus important sur la gouttelette dans ce cas pour **CGM I**. La valeur correspondante pour $\theta_c = 50^\circ$ est $\mathcal{B}_{\max} = 2.8166$ pour **CGM I**, tandis qu'elle est $\mathcal{B}_{\max} = 2.5619$ pour **CGM II**. Le diamètre d'étalement à l'équilibre est similaire, montrant un comportement global similaire entre les deux CGM après impact pour une surface mouillante. Dans le cas d'une surface non mouillante (Figure 6.7b), **CGM I** présente une oscillation avant l'équilibre à $nt = 113241$, ce qui n'est pas attendu à un faible nombre de Weber. Ceci est causé par la formation de petites bulles après impact, à la surface inférieure de la gouttelette.

Dans le cas présent d'un rapport de viscosités cinématiques élevé, le moment de relaxation est présent. La Figure 6.7 montre également que le facteur d'étalement à l'équilibre a une valeur nettement inférieure à sa valeur maximale \mathcal{B}_{\max} . La période de relaxation est plus prononcée pour une surface non mouillante.

Par ailleurs, une étude sur le profil de vitesse de la gouttelette $\overline{|(\vec{u})_y|}_h$ est réalisée et montrée dans la Figure 6.8 pour deux angles de contact. La vitesse maximale des gouttelettes est de 0.0096 dans le cas de **CGM I**, et de 0.0093 dans le cas de **CGM II**, ce qui est jugé similaire. En ce qui concerne les valeurs du nombre *Mach*, pour **CGM I**, $Mach_{\max} = 0.0541$, tandis que pour **CGM II**, il s'agit de $Mach_{\max} = 0.0705$. Ces valeurs indiquent que la faible compressibilité est respectée ($Mach < 0.1$), même si elles sont différentes. Les valeurs de vitesse à différents moments avant l'impact sont déduites comme étant presque égales, et le comportement de la gouttelette avant l'impact est identique. Cependant, il est à noter que certaines oscillations sont présentes dans les valeurs de vitesse pour **CGM I**, qui peuvent être dues à la propagation de la pression au temps initial, en raison de la différence de vitesse du son entre les deux phases *h* et *l*. Cela est observé sur les encarts de la Figure 6.8. Ce point donne un avantage majeur à **CGM II** dans le contexte de la modélisation de l'impact des gouttelettes, dans ce cas d'un rapport de viscosités cinématiques élevé.

Ainsi, la vérification code-à-code montre que le comportement des gouttelettes dans les deux cas, pour la modélisation de l'impact, n'est pas exactement identique, et que les différences sont faibles. Bien que ces différences puissent être dues au suivi mathématique de l'interface de chaque modèle, au traitement de la force volumique et aux différentes valeurs de la vitesse du son entre les deux modèles CGM, la différence de nombre *Mach* est supposée être le facteur principal. La prochaine étape consistera à étudier un cas avec un rapport de masses

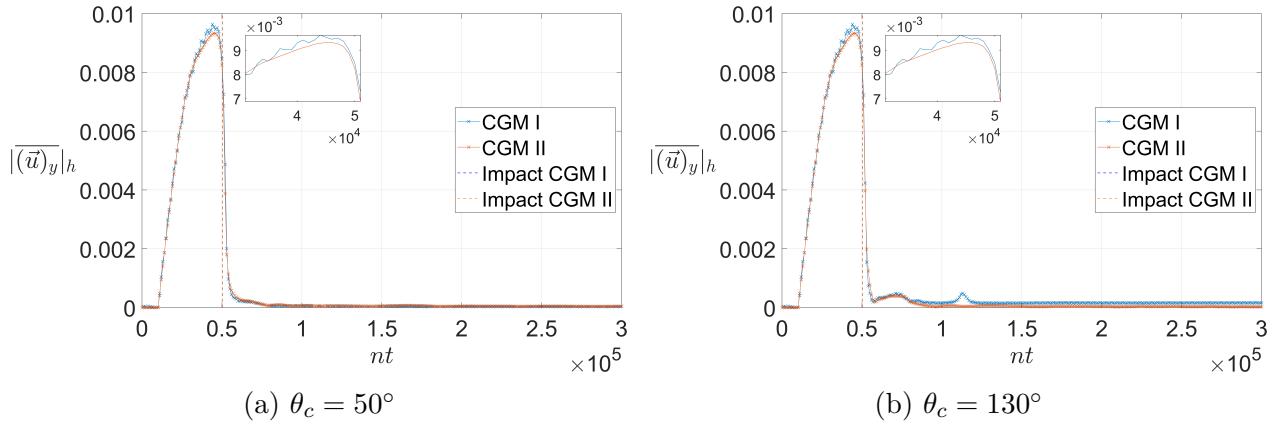


FIGURE 6.8 Évolution de la vitesse des gouttelettes $|\overline{(\vec{u})_y}|$ en fonction du temps pour un rapport de viscosité cinématique de 100. Les résultats sont présentés sur une partie de la simulation, soit $3 \times 10^5 \Delta t$. Les deux modèles CGM sont comparés

volumiques significativement plus élevé, conduisant à une augmentation du nombre de Weber.

6.4 Travail avancé avec le CGM II : nombre de Weber élevé

Dans cette section, un cas de simulation avec un nombre de Weber élevé est étudié. Un grand nombre de Weber pourrait impliquer une plus grande vitesse d'impact, pouvant compromettre l'hypothèse d'une faible compressibilité. Tout d'abord, certains éléments spécifiques de la méthodologie sont établis, puis les résultats et les discussions sont présentés.

6.4.1 Méthodologie de l'étude à haut nombre de Weber

Le temps d'étude est souvent sans dimension dans la littérature. Dans le contexte de ce travail avec un nombre de Weber élevé, le temps d'impact sans dimension \tilde{t} est défini comme suit :

$$\tilde{t} = \frac{nt}{t_{ref}} = \frac{D}{V}nt \quad (6.4)$$

où le temps de référence $t_{ref} = V/D$ est le résultat du rapport entre le diamètre caractéristique et les valeurs de vitesse caractéristiques de l'étude d'impact, c'est-à-dire le diamètre initial D et la vitesse d'impact V dans le contexte de ce travail.

Pour obtenir une vitesse d'impact élevée, la valeur de la force de gravité est augmentée. La tension interfaciale σ est également élevée, par rapport aux simulations précédentes, afin de maintenir le nombre de Bond suffisamment petit, de sorte que les forces de gravité ne do-

minent pas totalement les forces de tension. Le nombre de Weber étant relativement élevé, le paramètre d'éclaboussure $K = We\sqrt{Re}$ est évalué pour vérifier si un mécanisme d'éclaboussure peut se produire (possible si $K > 3000$). De plus, pour chaque modèle CGM, le nombre de *Mach* maximum dans l'espace et le temps doit être évalué. La raison est de vérifier si la faible compressibilité se maintient.

En outre, pour faciliter l'atteinte du nombre de Weber souhaité, borné entre 50 et 200, le maillage est raffiné.

6.4.2 Résultats de l'étude à haut nombre de Weber

En simulant un nombre de Weber élevé, l'écoulement à deux phases avec un rapport de masses volumiques élevé de $\rho_h/\rho_l = 1000$ est considéré dans le contexte de l'impact des gouttelettes sur une surface solide. Un maillage affiné des simulations précédentes est adopté pour augmenter le nombre de Weber et obtenir un plus grand nombre de Reynolds : $nx = ny = 801$. Les données sont définies pour atteindre un nombre d'Ohnesorge de 0.197, et pour pouvoir comparer les résultats avec ceux de l'article de Gupta et Kumar [4].

Il est à indiquer que les valeurs de certains paramètres d'entrée de la simulation n'ont pas été fournies dans cet article, notamment la force de gravité et la tension interfaciale (ou nombre de Bond), se limitant à exposer les nombres de Weber et de Reynolds. La valeur de l'angle de contact est également manquante. Cependant, il sera possible de tenter des comparaisons qualitatives avec les résultats présentés, en étudiant les mêmes intervalles des nombres adimensionnels en possession.

Les quantités d'entrée sont $|(\vec{g})_y| = 1 \times 10^{-7}$, $D = 100$, $\sigma = 0.1$, et les valeurs de la viscosité cinématique sont $\nu_h = \nu_l = 0.0197$. Le nombre de Bond est alors de 9.99. De plus, l'épaisseur de l'interface est $T = 8$ ($\beta = 0.25$). Il est déduit que le temps d'impact est de 120000 pas de temps. Dans ce cas, le nombre de Weber calculé est de 98.1, avec un nombre de Reynolds de 51.4. Le nombre d'Ohnesorge est identique à celui de [4] : $Oh = 0.197$. La valeur maximale du nombre *Mach* atteinte au cours de la simulation est de 0.0378 pour **CGM II**. L'évolution du facteur de propagation en fonction du temps est présentée dans la Figure 6.9. Les résultats montrent que le facteur de propagation maximal \mathcal{B}_{max} se situe dans la plage des valeurs des maximums de référence : en dessous de celui de $We = 140$ et au-dessus de celui de $We = 55.6$. Le paramètre d'éclaboussure K est environ 755 ($K < 3000$). Le mécanisme d'éclaboussure n'est donc pas attendu.

En comparant les résultats de **CGM II** et les données de référence, il est constaté que le moment cinématique prend plus de temps pour **CGM II**. Ensuite, la période d'étalement

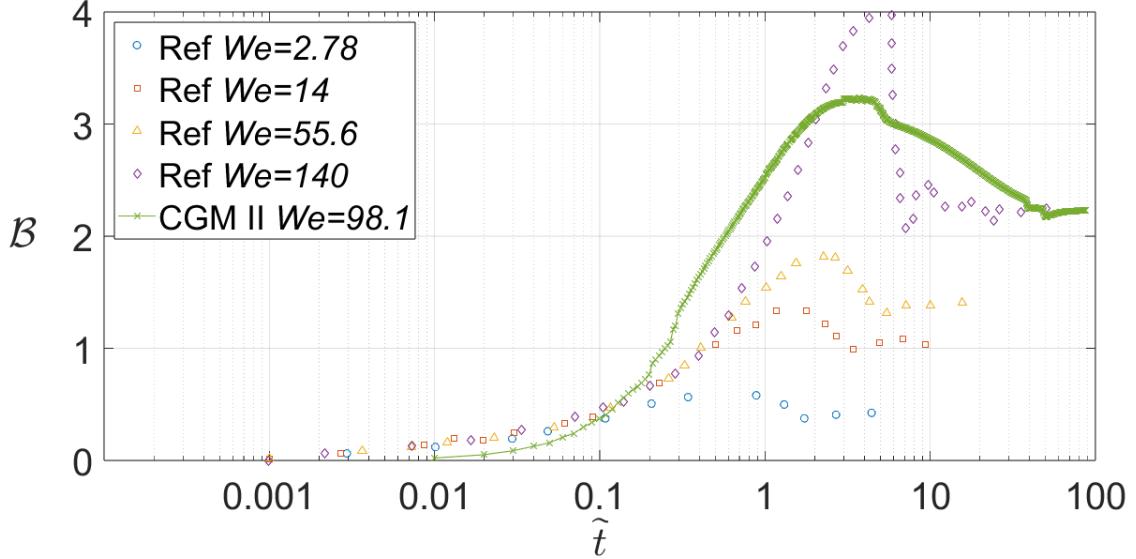


FIGURE 6.9 Évolution du facteur d'étalement \mathcal{B} en fonction du temps adimensionnel \tilde{t} . L'axe des x est tracé en échelle logarithmique. Le résultat de **CGM II** est mis en évidence en comparaison avec les données de la littérature de [4]. Une surface neutre est simulée ($\theta_c = 90^\circ$). Le nombre d'Ohnesorge est $Oh = 0.197$. Les valeurs de \mathcal{B} sont extraites en utilisant l'outil logiciel fourni dans [5]

commence à $\tilde{t} = 0.01$ et a un taux plus prononcé que les données de référence. Les données de **CGM II** et de la référence sont pratiquement égales dans la plage de $\tilde{t} = 0.1$ à $\tilde{t} = 0.2$. La valeur maximale du facteur d'étalement est atteinte vers $\tilde{t} = 3$.

Le moment de relaxation avant l'équilibre a une durée plus longue pour **CGM II** que les données de la littérature. La différence peut également s'expliquer par la valeur de l'angle de contact choisi. Un angle de contact plus petit implique une surface plus mouillante, ce qui réduit la manifestation du moment de relaxation.

Note sur la simulation avec CGM I Les mêmes entrées LBM ont été simulées avec **CGM I**. La vitesse maximale de la gouttelette est atteinte avant l'impact, avec une valeur maximale d'environ 0.01. Cela génère des effets de compressibilité élevés, pour le **CGM I**. Le nombre *Mach* atteint alors une valeur de 0.7417 pour **CGM I**. Un nombre de *Mach* élevé se traduit par une masse volumique supérieure à la valeur initiale de la masse volumique de la gouttelette, ce qui indique une modélisation physique incohérente. La valeur maximale atteinte pour la masse volumique normalisée par la masse volumique initiale de la gouttelette est $\rho_h/\rho_h^0 = 2.3912$. Ceci s'explique par la différence des valeurs de vitesse du son dans les deux phases, augmentée à des rapports de masses volumiques élevés. Par conséquent, le modèle **CGM I** n'est pas adapté au cas présent puisque l'hypothèse de faible compressibilité

n'est pas respectée. Le modèle **CGM I** est donc jugé limité à des cas simples avec de faibles valeurs de rapports de masses volumiques, permettant d'éviter l'obtention de valeurs élevées du nombre de *Mach*. Pour **CGM I**, des oscillations significatives du profil de vitesse se manifestent après l'impact, et le facteur d'étalement \mathcal{B} dépasse celui des travaux de Gupta et Kumar [4].

Pour terminer, une étude paramétrique sur l'angle de contact est réalisée, avec les mêmes quantités d'entrée. Le résultat de l'évolution du facteur d'étalement maximal est présenté dans la Figure 6.10.

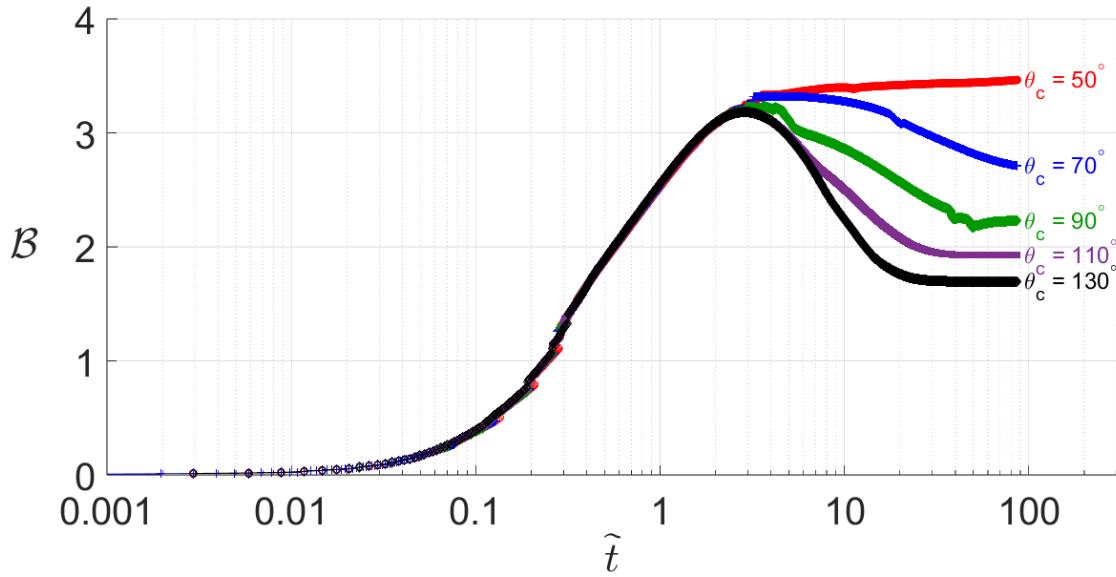


FIGURE 6.10 Évolution du facteur d'étalement \mathcal{B} en fonction du temps adimensionnel \tilde{t} pour cinq angles de contact différents. Le nombre d'Ohnesorge est $Oh = 0.197$. Le nombre de Weber est $We = 98.1$

Il est constaté que les moments cinématiques et d'étalement sont très peu influencés par l'angle de contact dans ce cas. Les différences commencent à se manifester au moment de relaxation, si existantes, et au moment d'équilibre. Le moment de relaxation est d'autant prononcé que l'angle de contact θ_c est élevé. Naturellement, un angle de contact faible implique un facteur d'étalement plus grand. Pour une surface très mouillante où $\theta_c = 50^\circ$, le moment de relaxation est absent, ce qui est aussi cohérent, car une forte mouillabilité empêche la gouttelette de se rétracter une fois qu'elle s'est étalée. Ainsi, l'intensité du moment de relaxation diminue en augmentant l'angle de contact θ_c . En effet, l'adhérence de la gouttelette à la paroi est forte dans ce cas-là. Pour cette surface, le moment d'étalement dure longtemps et le facteur d'étalement \mathcal{B} continue d'augmenter jusqu'à atteindre \mathcal{B}_{\max} à l'équilibre.

CHAPITRE 7 CONCLUSION

Le présent travail a porté sur la présentation de deux modèles multiphasiques de la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM), appartenant à la famille de la méthode du gradient de couleur (CGM). Des études comparatives entre les modèles **CGM I** et **CGM II** ont été réalisées, pour un écoulement à deux phases dans un domaine rectangulaire bidimensionnel. Cet écoulement est supposé faiblement compressible, isotherme, ayant des fluides immiscibles.

7.1 Synthèse des travaux

En premier lieu, une revue de littérature a été réalisée. L'outil numérique multiphasique de la CGM a été présenté. Des améliorations effectuées ont abouti au développement de deux versions récentes du modèle CGM : **CGM I** et **CGM II**. Tandis que le modèle de Leclaire *et al.* [40] (**CGM I**) est connu pour sa robustesse et sa stabilité à des rapports de masses volumiques de type liquide-liquide, adapté à des rapports de viscosités cinématiques variées, celui de Subhedar [42] (**CGM II**) est dérivé de nouvelles formulations permettant d'augmenter ces rapports de masse volumique, tout en maintenant la même stabilité numérique. La masse volumique et la pression dans les régions internes ont été découplées en modifiant la fonction de distribution d'équilibre basée sur la vitesse, sans masse volumique. Comme le prouve Subhedar dans son travail, le modèle CGM élaboré manifeste moins de courants parasites que les modèles CGM précédents, et permet d'ajuster la mobilité de l'interface indépendamment du rapport de masse volumique. Par la suite, un éventail de travaux autour de la mouillabilité est fourni. Différentes techniques ont été proposées pour imposer l'angle de contact. L'approche sélectionnée est celle d'Akai *et al.* [46], fonctionnant par correction géométrique à chaque pas de temps numérique. Enfin, les travaux 2D et 3D consultés suggèrent que le profil du diamètre d'une gouttelette, à la suite d'impact par une surface solide, suit quatre moments, soit le moment cinématique, d'étalement, de relaxation et d'équilibre.

En deuxième lieu, après avoir présenté l'origine et le développement de la LBM, les éléments principaux mathématiques et numériques de la LBM à simple phase ont été discutés, en focalisant sur la discrétisation de l'espace des phases $DdQq$ et les étapes de collision et de propagation. Le modèle $D2Q9$ est utilisé. De plus, il a été expliqué que les équations macroscopiques récupérées ne correspondent pas nécessairement aux équations de Navier-Stokes. Certains avantages majeurs de la LBM ont été abordés, notamment la possibilité de parallélisation et la linéarité de la convection, étant formulée avec un schéma explicite.

Ensuite, des simulations d'écoulements mettant en jeu l'interaction fluide-fluide ont été réalisées. Les modèles **CGM I** et **CGM II** sont capables de traiter des rapports de masses volumiques et de viscosités cinématiques différents de l'unité. Trois cas tests ont été étudiés : écoulement stationnaire de Laplace, écoulement de Poiseuille à deux couches, et instabilité de Rayleigh-Taylor. Un avantage est déduit pour **CGM II** dans le cas de rapport de masses volumiques élevé, surtout lors de l'analyse des résultats du dernier cas test. La stabilité est meilleure et la magnitude des courants parasites est moindre que pour **CGM I**.

Par ailleurs, une condition de mouillabilité a été implémentée aux deux modèles CGM. L'orientation de l'angle de contact est corrigée à chaque pas de temps LBM. Les deux modèles sont capables de simuler des cas de rapports de masses volumiques et de viscosités cinématiques élevées atteignant 1000 et 100 respectivement. L'étude de raffinement de l'erreur de masse montre un ordre de convergence autour de 1.

Finalement, une analyse qualitative des résultats de simulations d'impact de gouttelette sur une surface solide, sèche, et droite est effectuée. Le modèle **CGM II** est mieux adapté à des cas de rapports de masses volumiques élevées. Avec un nombre de Weber relativement élevé, la dernière simulation a montré une tendance similaire à celle des données de la littérature.

7.2 Limitations de la solution proposée

Certaines limitations sont relevées et mises en avant dans la liste suivante :

- La stabilité du modèle **CGM II** a été améliorée en employant des limiteurs *min* et *max*. Ceci compromet légèrement la conservation de la masse théorique.
- Le nombre de pas de temps numériques pour l'atteinte d'un état stationnaire peut être jugé élevé, surtout si les conditions de mouillabilité sont incluses et que le maillage est significativement raffiné. Ceci nécessite l'emploi des cartes graphiques **GPU**, pour accélérer les calculs.
- L'augmentation des rapports de masses volumiques et de viscosités cinématiques implique une élévation significative du temps de calcul d'une simulation avec la CGM.
- Le modèle **CGM I** peut perdre en stabilité numérique pour des cas d'écoulements dynamiques, en particulier lors de l'augmentation du rapport de masses volumiques.

7.3 Améliorations futures

Pour clore ce travail, des améliorations futures potentielles sont suggérées :

- Un défi important consiste à traiter les applications de transfert de chaleur. Le modèle multiphasique LBM a une limitation intrinsèque, à savoir qu'il ne tient pas compte de

l'évolution de la chaleur et de son absorption [32]. Malgré cela, certains auteurs ont déjà commencé à étudier les approches à suivre pour mettre en œuvre le mécanisme de transfert de chaleur dans le modèle LBM-CGM, dont il est possible de citer le travail de Lee H et Lee S [78]. Les travaux futurs permettront d'améliorer la LBM thermique pour la coupler au CGM et ainsi traiter des phénomènes plus réalistes tels que l'évaporation ou le givrage.

- Pour améliorer encore la stabilité du modèle numérique CGM actuel SRT, il sera possible de développer un modèle MRT. Ce renforcement permettra principalement de diminuer la viscosité, et ainsi d'étendre les nombres de Reynolds et de Weber.
- Le type de surface traité pourra être modifié à des surfaces de type curvilignes, et développer un modèle de mouillabilité correspondant, en adoptant par exemple les techniques d'interpolation et d'extrapolation.
- Des études similaires peuvent être abordées pour des écoulements à trois phases de type solide-liquide-gaz, et pour des situations tridimensionnelles. À titre d'illustration, une étude plus approfondie d'impact de gouttelette pourra consister en des comparaisons quantitatives avec le travail 3D de Gupta et Kumar [79].

RÉFÉRENCES

- [1] C. Josserand et S. T. Thoroddsen, “Drop impact on a solid surface,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 48, p. 365–391, 2016. [En ligne]. Disponible : <https://www.annualreviews.org/docserver/fulltext/fluid/48/1/annurev-fluid-122414-034401.pdf?expires=1738855552&id=id&accname=guest&checksum=DF6BC115C5BA46A6C22729EFFB10E11E>
- [2] M. Antonin *et al.*, “Why is surface tension a force parallel to the interface?” *American Journal of Physics*, vol. 79, p. 999–1008, 2011. [En ligne]. Disponible : <https://pubs.aip.org/aapt/ajp/article/79/10/999/1043742/Why-is-surface-tension-a-force-parallel-to-the>
- [3] A. R. G. Harwood et A. J. Revell, “Parallelisation of an interactive lattice-boltzmann method on an android-powered mobile device,” *Advances in Engineering Software*, vol. 104, p. 38–50, 2017. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0965997816301855>
- [4] A. Gupta et R. Kumar, “Two-dimensional lattice boltzmann model for droplet impingement and breakup in low density ratio liquids,” *Communications in Computational Physics*, vol. 10, n°. 3, p. 767–784, 2011. [En ligne]. Disponible : https://web.iitd.ac.in/~agupta/Papers/Gupta_Kumar_CICP2011.pdf
- [5] EECS. WebPlotDigitizer. [En ligne]. Disponible : <https://web.eecs.utk.edu/~dcostine/personal/PowerDeviceLib/DigiTest/index.html>
- [6] G. d. Canada, “Remotely piloted aircraft system (rpas),” 2024. [En ligne]. Disponible : <https://www.canada.ca/en/department-national-defence/services/procurement/remotely-piloted-aircraft-system.html>
- [7] F. T. Smith, L. Li et G. X. Wu, “Air cushioning with a lubrication/inviscid balance,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 482, p. 291–318, 2003. [En ligne]. Disponible : <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/air-cushioning-with-a-lubricationinviscid-balance/607E5420FE6A4F15662361B21FE71B36>
- [8] A. A. Korobkin, A. S. Ellis et F. T. Smith, “Trapping of air in impact between a body and shallow water,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 611, p. 365–394, 2008. [En ligne]. Disponible : <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/trapping-of-air-in-impact-between-a-body-and-shallow-water/3BD13FE212FB83C8425E1321E5107807>

- [9] P. D. Hicks et R. Purvis, “Air cushioning and bubble entrapment in three-dimensional droplet impacts,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 649, p. 135–163, 2010. [En ligne]. Disponible : <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/air-cushioning-and-bubble-entrapment-in-threedimensional-droplet-impacts/58A18F60029B3FADBB240A6A1120F4B1>
- [10] S. Mandre, M. Mani et M. P. Brenner, “Precursors to splashing of liquid droplets on a solid surface,” *Physical Review Letters*, vol. 102, n°. 13, 2009. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/prl/pdf/10.1103/PhysRevLett.102.134502>
- [11] J. M. Kolinski *et al.*, “Skating on a film of air : Drops impacting on a surface,” *Physical Review Letters*, vol. 108, n°. 7, 2012. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/prl/pdf/10.1103/PhysRevLett.108.074503>
- [12] J. de Ruiter, D. van den Ende et F. Mugele, “Air cushioning in droplet impact. ii. experimental characterization of the air film evolution,” *Physics of Fluids*, vol. 27, n°. 1, 2015. [En ligne]. Disponible : <https://pubs.aip.org/aip/pof/article/27/1/012105/915806/Air-cushioning-in-droplet-impact-II-Experimental>
- [13] Y. Deng *et al.*, “The dynamics of the droplet impact and rebound : A lattice boltzmann study,” *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, vol. 105, p. 313–326, 2024. [En ligne]. Disponible : <http://dx.doi.org/10.1016/j.euromechflu.2024.02.001>
- [14] D. C. Vadillo *et al.*, “Dynamic contact angle effects onto the maximum drop impact spreading on solid surfaces,” *Physics of Fluids*, vol. 21, n°. 12, 2009. [En ligne]. Disponible : <https://pubs.aip.org/aip/pof/article/21/12/122002/256184/Dynamic-contact-angle-effects-onto-the-maximum>
- [15] Q. Xu *et al.*, “Characteristics of single droplet impact on cold plate surfaces,” *Drying Technology*, vol. 30, n°. 15, p. 1756–1762, 2012.
- [16] P. J. Garcia, “Lattice boltzmann approach for the modeling and simulation of water droplets impact and freezing,” thèse de doctorat, Dép. de génie aérospatial, École Polytechnique de Montréal, Montréal, QC, 2020. [En ligne]. Disponible : <https://publications.polymtl.ca/5365/>
- [17] D. Bartolo, C. Josserand et D. Bonn, “Singular jets and bubbles in drop impact,” *Physical Review Letters*, vol. 96, n°. 12, 2006. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/prl/pdf/10.1103/PhysRevLett.96.124501>
- [18] L. Xu, L. Barcos et S. R. Nagel, “Splashing of liquids : Interplay of surface roughness with surrounding gas,” *Physical Review E*, vol. 76, n°. 6, 2007. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.76.066311>
- [19] D. A. Perumal et A. K. Dass, “A review on the development of lattice boltzmann computation of macro fluid flows and heat transfer,” *Alexandra*

- Enginnering Journal*, vol. 54, p. 955–971, 2015. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1110016815001362>
- [20] T. Krüger *et al.*, *The Lattice Boltzmann Method Principles and Practice*. Springer, 2017. [En ligne]. Disponible : <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-319-44649-3>
- [21] C. Elsworth *et al.* (2014) Lattice boltzmann method. SlideShare. [En ligne]. Disponible : https://personal.ems.psu.edu/~fkd/courses/EGEE520/2014Deliverables/LBM_2014.pdf
- [22] L. Huang *et al.*, “Molecular dynamics promotes study of droplet electrocoalescence : A mini-review,” *Journal of Electrostatics*, vol. 129, 2024. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304388624000366?via%3Dihub>
- [23] S. Succi, “Lattice fluid dynamics : Thirty-five years down the road,” Institut de France, Report, 2023. [En ligne]. Disponible : <https://comptes-rendus.academie-sciences.fr/mecanique/item/10.5802/crmeca.161.pdf>
- [24] F.-F. C. of Engineering, “External flows,” SlideShare. [En ligne]. Disponible : <https://www.eng.famu.fsu.edu/~shih/eml3016/lecture-notes/external%20flows.ppt>
- [25] S. Xiaowen et C. Hudong, “Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components,” *Physical Review E*, vol. 47, n°. 3, 1993. [En ligne]. Disponible : https://www.academia.edu/95421412/Lattice_Boltzmann_model_for_simulating_flows_with_multiple_phases_and_components?email_work_card=view-paper
- [26] Q. Li *et al.*, “Lattice boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 52, p. 62–105, 2016. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128515300162>
- [27] S. Ammar, G. Pernaudat et J. Y. Trépanier, “A multiphase three-dimensional multi-relaxation time (mrt) lattice boltzmann model with surface tension adjustment,” *Journal of Computational Physics*, vol. 343, p. 73–91, 2017. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999117303248>
- [28] J. H. Yang et E. S. Boek, “A comparison study of multi-component lattice boltzmann models for flow in porous media applications,” *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 65, n°. 6, p. 882–890, 2013. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122112006839>
- [29] D. H. Rothman et J. M. Keller, “Immiscible cellular-automaton fluids,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 52, n°. 3-4, p. 1119–1127, 1988. [En ligne]. Disponible : <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01019743>
- [30] A. K. Gunstensen *et al.*, “Lattice boltzmann model of immiscible fluids,” *Physical Review A*, vol. 43, n°. 8, p. 4320–4327, 1991. [En ligne]. Disponible :

- <https://journals.aps.org/pra/pdf/10.1103/PhysRevA.43.4320>
- [31] A. K. Gunstensen et D. H. Rothman, “Microscopic modeling of immiscible fluids in 3 dimensions by a lattice boltzmann method,” *Europhysics Letters*, vol. 18, n°. 2bis, p. 157–161, 1992. [En ligne]. Disponible : <https://iopscience.iop.org/article/10.1209/0295-5075/18/2/012/pdf>
- [32] K. Kono *et al.*, “Application of lattice boltzmann model to multiphase flows with phase transition,” *Computer Physics Communications*, vol. 129, n°. 1-3, p. 110–120, 2000. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465500000989>
- [33] M. Latva-Kokko et D. H. Rothman, “Static contact angle in lattice boltzmann models of immiscible fluids,” *Physical Review E*, vol. 72, n°. 4, 2005. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.72.046701>
- [34] S. Leclaire, M. Reggio et J.-Y. Trepanier, “Numerical evaluation of two recoloring operators for an immiscible two-phase flow lattice boltzmann model,” *Applied Mathematical Modelling*, vol. 36, n°. 5, p. 2237–2252, 2012. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0307904X11005270>
- [35] ——, “Isotropic color gradient for simulating very high-density ratios with a two-phase flow lattice boltzmann model,” *Computers and Fluids*, vol. 48, n°. 1, p. 98–112, 2011. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793011001174>
- [36] ——, “Progress and investigation on lattice boltzmann modeling of multiple immiscible fluids or components with variable density and viscosity ratios,” *Journal of Computational Physics*, vol. 246, p. 318–342, 2013. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999113002179>
- [37] S. Leclaire *et al.*, “Unsteady immiscible multiphase flow validation of a multiple relaxation-time lattice boltzmann method,” *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretica*, vol. 47, 2014. [En ligne]. Disponible : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8113/47/10/105501/pdf>
- [38] ——, “An approach to control the spurious currents in a multiphase lattice boltzmann method and to improve the implementation of initial condition,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 77, n°. 12, p. 732–46, 2015. [En ligne]. Disponible : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/fld.4002>
- [39] ——, “A multiphase lattice boltzmann method for simulating immiscible liquid-liquid interface dynamics,” *Applied Mathematical Modelling*, vol. 40, n°. 13-14, p. 6376–94, 2016. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0307904X16300452>

- [40] ——, “Generalized three-dimensional lattice boltzmann color-gradient method for immiscible two-phase pore-scale imbibition and drainage in porous media,” *Physical Review E*, vol. 95, n°. 3, 2017. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.95.033306>
- [41] ——, “Enhanced equilibrium distribution functions for simulating immiscible multiphase flows with variable density ratios in a class of lattice boltzmann models,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 57, p. 159–168, 2013. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932213001043>
- [42] A. Subhedar, “Color-gradient lattice boltzmann model for immiscible fluids with density contrast,” *Physical Review E*, vol. 106, n°. 4, 2022. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.106.045308>
- [43] Y. Q. Zu et S. He, “Phase-field-based lattice boltzmann model for incompressible binary fluid systems with density and viscosity contrasts,” *Physical Review E*, vol. 87, n°. 4, 2013. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.87.043301>
- [44] S. Leclaire *et al.*, “Modeling of static contact angles with curved boundaries using a multiphase lattice boltzmann method with variable density and viscosity ratios,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 82, n°. 8, p. 451–70, 2016. [En ligne]. Disponible : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/fld.4226>
- [45] H. B. Huang *et al.*, “On simulations of high-density ratio flows using color-gradient multiphase lattice boltzmann models,” *International Journal of Modern Physics C*, vol. 24, n°. 4, 2013. [En ligne]. Disponible : <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0129183113500216?srslid=AfmBOorSSrtRz9toSfhSMZr5n3bHXg8sNKjHqePMkIondIr3WBNVI194>
- [46] T. Akai, B. Bijeljic et M. J. Blunt, “Wetting boundary condition for the color-gradient lattice boltzmann method : Validation with analytical and experimental data,” *Advances in Water Resources*, vol. 116, p. 56–66, 2018. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030917081731028X>
- [47] T. Lafarge *et al.*, “Improved color-gradient method for lattice boltzmann modeling of two-phase flows,” *Physics of Fluids*, vol. 33, n°. 8, 2021. [En ligne]. Disponible : <https://hal.science/hal-03324224/document>
- [48] M. Latva-Kokko et D. H. Rothman, “Diffusion properties of gradient-based lattice boltzmann models of immiscible fluids,” *Physical Review E*, vol. 71, n°. 5, 2005. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/pdf/10.1103/PhysRevE.71.056702>
- [49] L. Chen *et al.*, “A critical review of the pseudopotential multiphase lattice boltzmann model : Methods and applications,” *International Journal of Heat*

- and Mass Transfer*, vol. 76, p. 210–236, 2014. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931014003378>
- [50] D. Jacqmin, “Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 402, p. 57–88, 2000. [En ligne]. Disponible : <https://www.cambridge.org/core/services/aop-cambridge-core/content/view/7B60641B689D38EA55E30FB1ABDC76E5/S0022112099006874a.pdf/contact-line-dynamics-of-a-diffuse-fluid-interface.pdf>
- [51] A. Fakhari et D. Bolster, “Diffuse interface modeling of three-phase contact line dynamics on curved boundaries : A lattice boltzmann model for large density and viscosity ratios,” *Journal of Computational Physics*, vol. 334, p. 620–638, 2017. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999117300414>
- [52] H. Huang *et al.*, “Proposed approximation for contact angles in shan-and-chen-type multicomponent multiphase lattice boltzmann models,” *Physical Review E*, vol. 76, n°. 6, 2007. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/pdf/10.1103/PhysRevE.76.066701>
- [53] Q. Li *et al.*, “Contact angles in the pseudopotential lattice boltzmann modeling of wetting,” *Physical Review E*, vol. 90, n°. 5, 2014. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.90.053301>
- [54] 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, 1992. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/002199919290240Y>
- [55] Z. Y. Xu, H. H. Liu et A. J. Valocchi, “Lattice boltzmann simulation of immiscible two-phase flow with capillary valve effect in porous media,” *Water Resources Research*, vol. 53, n°. 5, p. 3770–3790, 2017. [En ligne]. Disponible : <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/2017WR020373>
- [56] N. N. Wang *et al.*, “Wetting boundary condition for three-dimensional curved geometries in lattice boltzmann color-gradient model,” *Physics of Fluids*, vol. 36, n°. 3, 2024. [En ligne]. Disponible : <https://pubs.aip.org/aip/pof/article/36/3/032133/3279120/Wetting-boundary-condition-for-three-dimensional>
- [57] J. Y. Shao *et al.*, “Free-energy-based lattice boltzmann model for the simulation of multiphase flows with density contrast,” *Physical Review E*, vol. 89, n°. 3, 2014. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.89.033309>
- [58] Y. Wang, C. Shu et L. M. Yang, “An improved multiphase lattice boltzmann flux solver for three-dimensional flows with large density ratio and high reynolds number,” *Journal of Computational Physics*, vol. 302, p. 41–58, 2015. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999115005781>

- [59] Q. J. Kang, D. X. Zhang et S. Y. Chen, “Displacement of a two-dimensional immiscible droplet in a channel,” *Physics of Fluids*, vol. 14, n°. 9, p. 3203–3214, 2002. [En ligne]. Disponible : <https://pubs.aip.org/aip/pof/article/14/9/3203/255617/Displacement-of-a-two-dimensional-immiscible>
- [60] H. Yuan *et al.*, “Double droplet splashing on a thin liquid film with a pseudopotential lattice boltzmann method,” *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. 15, n°. 1, p. 964–984, 2021. [En ligne]. Disponible : <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/19942060.2021.1934547#d1e207>
- [61] D. Toshiyuki, “Poiseuille flow and thermal transpiration of a rarefied gas between parallel plated ii : effect of nonuniform surface properties in the longitudinal direction,” *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, 2015. [En ligne]. Disponible : <https://link.springer.com/article/10.1007/s00033-015-0580-4>
- [62] U. Frisch, B. Hasslacher et Y. Pomeau, “Lattice-gas automata for the navier-stokes equation,” *Physical Review Letters*, vol. 56, n°. 14, 1986. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.56.1505>
- [63] P. Matteo, “2d and 3d verification and validation of the lattice boltzmann method,” thèse de doctorat, Dép. de génie mécanique, École Polytechnique de Montréal, 2015. [En ligne]. Disponible : https://publications.polymtl.ca/1927/1/2015_MatteoPortinari.pdf
- [64] B. D. John, “Validation of the lattice boltzmann method for direct numerical simulation of wall-bounded turbulent flows,” thèse de doctorat, Dép. d’ingénierie mécanique et des matériaux, Université Queen, 2011. [En ligne]. Disponible : <https://qspace.library.queensu.ca/server/api/core/bitstreams/4c312cce-cbf8-4d62-a4fd-d29019d59c26/content>
- [65] Z. Gianluigi et M. G. R., “Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata,” *Physical Review Letters*, vol. 61, n°. 20, 1988. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.61.2332>
- [66] W. B. Feng *et al.*, “Compressible lattice boltzmann method and applications,” *High Performance Computing and Applications*, vol. 5938, p. 17–+, 2010. [En ligne]. Disponible : https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-11842-5_3
- [67] R. R. Nourgaliev *et al.*, “The lattice boltzmann equation method : theoretical interpretation, numerics and implications,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 29, n°. 1, p. 117–169, 2003. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932202001088>
- [68] L. Jonas, “Hydrodynamic limit of lattice boltzmann equations,” thèse de doctorat, Dép. d’informatique et de physique, Université de Genève, 2007. [En ligne]. Disponible : <https://archive-ouverte.unige.ch//unige:464>

- [69] S. Leclaire *et al.*, “Validation of the pressure drop-flow rate relationship predicted by lattice boltzmann simulations for immiscible liquid-liquid flows through smx static mixers,” *Chemical Engineering Research & Design*, vol. 153, p. 350–368, 2020. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263876219305052>
- [70] F. Dubois, B. M. Boghosian et P. Lallemand, “General fourth-order chapman-enskog expansion of lattice boltzmann schemes ?” *Computers & Fluids*, vol. 266, 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004579302300261X>
- [71] M. Namvar et S. Leclaire, “Labcof : Lattice boltzmann boundary condition framework,” *Computer Physics Communications*, vol. 285, 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465522003666>
- [72] D. Yu *et al.*, “Viscous flow computations with the method of lattice boltzmann equation,” *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 39, n°. 5, p. 329–367, 2003. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0376042103000034>
- [73] T. Reis et T. N. Phillips, “Lattice boltzmann model for simulating immiscible two-phase flows,” *Journal of Physics a-Mathematical and Theoretical*, vol. 40, n°. 14, p. 4033–4053, 2007. [En ligne]. Disponible : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8113/40/14/018/pdf>
- [74] A. Fakhari *et al.*, “Improved locality of the phase-field lattice-boltzmann model for immiscible fluids at high density ratios,” *Physical Review E*, vol. 96, n°. 5, 2017. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/pdf/10.1103/PhysRevE.96.053301>
- [75] J. Latt *et al.*, “Straight velocity boundaries in the lattice boltzmann method,” *Physical Review E*, vol. 77, n°. 5, 2008. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/pdf/10.1103/PhysRevE.77.056703>
- [76] A. Subhedar *et al.*, “Interface tracking characteristics of color-gradient lattice boltzmann model for immiscible fluids,” *Physical Review E*, vol. 101, n°. 1, 2020. [En ligne]. Disponible : <https://journals.aps.org/pre/pdf/10.1103/PhysRevE.101.013313>
- [77] L. Vanderbecken, “Rapport de maîtrise - mec6902 : Projet de maîtrise ii,” 2023, rapport présenté à Polytechnique Montréal dans le cadre du programme de maîtrise en ingénierie.
- [78] H. M. Lee et J. S. Lee, “Effects of heat transfer on particle suspended drop-on-demand inkjet printing using lattice boltzmann method,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 213, 2022. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431122005841>
- [79] A. Gupta et R. Kumar, “Droplet impingement and breakup on a dry surface,” *Computers & Fluids*, vol. 39, n°. 9, p. 1696–1703, 2010. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793010001374>

- [80] F. Dubois, P. Lallemand et M. M. Tekitek, “Generalized bounce back boundary condition for the nine velocities two-dimensional lattice boltzmann scheme,” *Computers & Fluids*, vol. 193, 2019. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793017302396>

ANNEXE A CONDITIONS AUX LIMITES GÉNÉRALES

En plus de l'évaluation des fonctions de distribution de probabilité (PDF) dans les régions loin des bords, il est nécessaire de calculer leurs valeurs de manière adéquate dans les limites du domaine spatial afin d'imposer les conditions macroscopiques souhaitées. Même si, par exemple, la vitesse ou la masse volumique est connue et imposée à un bord, il s'agirait de disposer d'une méthodologie afin de pouvoir déduire les fonctions discrètes f_i . De nombreux auteurs considèrent qu'il s'agit de l'une des parties les plus difficiles de la LBM, comme dans [72]. Cette étape nécessite la disposition de méthodes spécifiques pour convertir les variables macroscopiques imposées aux frontières en variables mésoscopiques. Elle constitue donc potentiellement une limitation de la méthode par rapport aux méthodes classiques pour N-S. Cependant, il existe des méthodes bien établies pour définir avec succès les conditions aux limites mésoscopiques, à partir des quantités macroscopiques, comme ρ et \vec{u} . Cette section décrit brièvement les types de conditions frontières qu'il est possible de rencontrer lors de la résolution d'une application d'écoulement de fluide à l'aide de la LBM, qui sont principalement conçues pour les écoulements monophasiques. Elles font partie intégrante de l'algorithme de calcul de la LBM et permettent d'identifier les valeurs aux noeuds limites pour les populations manquantes.

Il est à noter que la LBM est bien adaptée aux grilles de type cartésien. Elle n'est pas nécessairement conforme aux bords curvilignes. Dans ce cas par exemple, il sera nécessaire d'effectuer des interpolations ou même des extrapolations, ce qui nécessitera des coûts de calcul plus élevés et causera probablement plus d'erreurs d'approximation. Ce type de cas n'est pas traité dans le présent travail.

En outre, le choix de la condition aux limites à mettre en œuvre dépend de la géométrie du domaine, de l'application envisagée et de la condition la mieux adaptée à la stabilité et à la précision numériques souhaitées.

Les principales conditions limites utilisées dans le contexte de la LBM sont : Les conditions périodiques, les conditions de non glissement *bounce-back*, les conditions aux limites de Zou et He, les conditions frontières libres (*Free boundary conditions*) et les conditions aux limites d'équilibre (*Equilibrium boundary conditions*). Une attention particulière est portée aux deux premières conditions énumérées, qui sont utilisées lors des simulations dans ce mémoire.

Les conditions limites périodiques sont largement utilisées car elles sont faciles à mettre en œuvre et bien adaptées aux domaines cartésiens où le maillage est constitué de formes

rectangulaires, en particulier en 2D. Elles peuvent être employées dans les cas où la solution de l'écoulement a un comportement périodique. Pour une description plus technique, les particules du fluide qui quittent le domaine d'un côté y reviennent du côté opposé [20], comme dans la Figure A.1. Il s'agit d'une approche “wet node” car les nœuds où ces conditions sont appliquées sont des noeuds de type fluides [63].

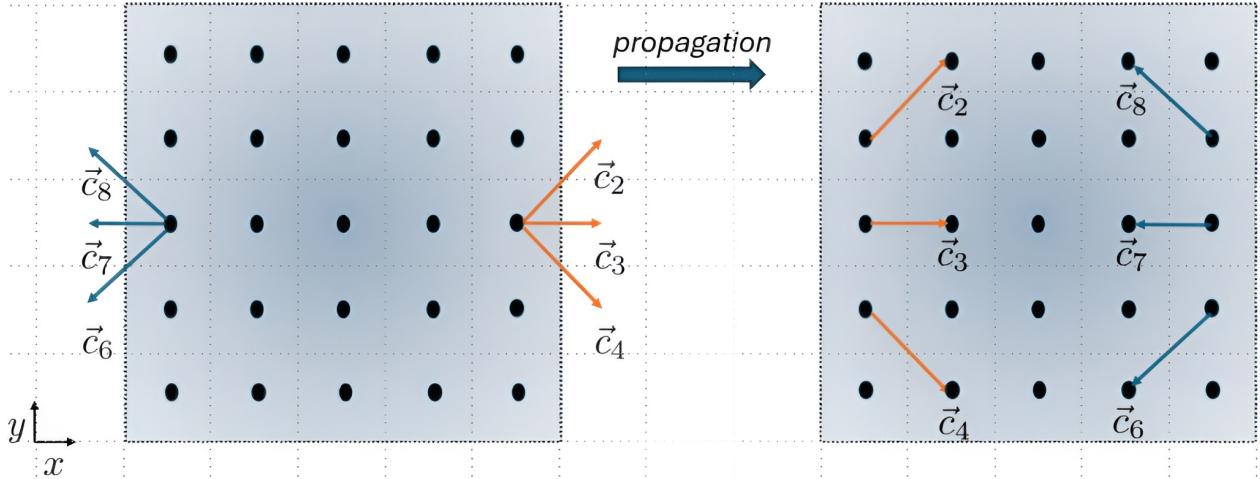


FIGURE A.1 Illustration des conditions frontières périodiques avant et après l'étape de propagation, le long de la direction x . La frontière physique est à mi-chemin entre les nœuds

Cependant, dans le cas de parois solides (c'est-à-dire de nœuds solides), les conditions limites de rebond (*bounce-back*) sont adoptées. Elles permettent de respecter la condition limite de vitesse sans glissement. En d'autres termes, la vitesse du fluide en contact avec les limites solides fixes est égale à 0, lorsqu'il s'agit de parois en repos [80]. Le principe de fonctionnement consiste à renvoyer les populations distribuées à leur point de départ, après avoir heurté les parois [20]. Ils sont divisés en deux catégories : La condition de rebond complet (*Fullway bounce-back*), tel que présenté dans la Figure A.2 et le rebond à mi-chemin (*Half-way bounce-back*), illustré dans la Figure A.3. La condition de rebond complet s'agit plutôt d'une technique de type “*dry node*” : les nœuds frontières se trouvent en dehors de la région du fluide [63]. Tandis que le rebond complet nécessite l'utilisation de noeuds solides lors de l'étape de collision, l'utilisation du rebond à mi-chemin implique des modifications sur l'étape de propagation proche des parois solides.

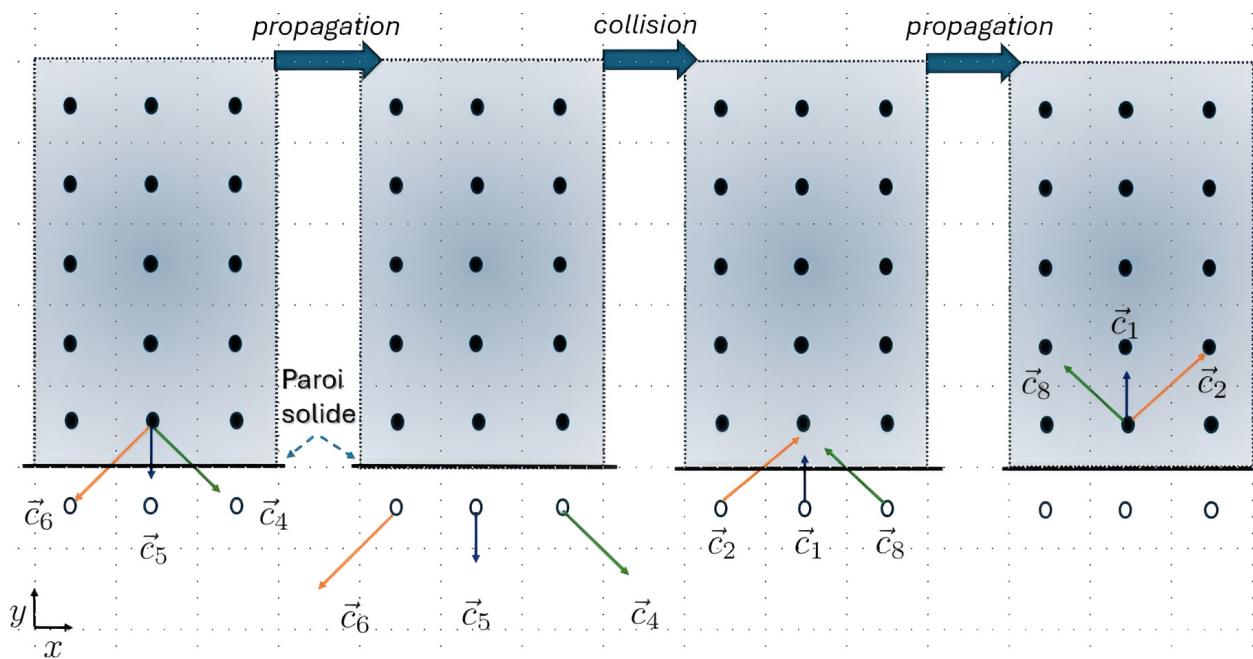


FIGURE A.2 Illustration des conditions limites de rebond complet (*Fullway bounce-back*) avec deux étapes de propagation, le long de la direction y . La collision ne s'applique que sur les nœuds fluides. Durant la collision, les PDFs sont inversées dans les nœuds solides

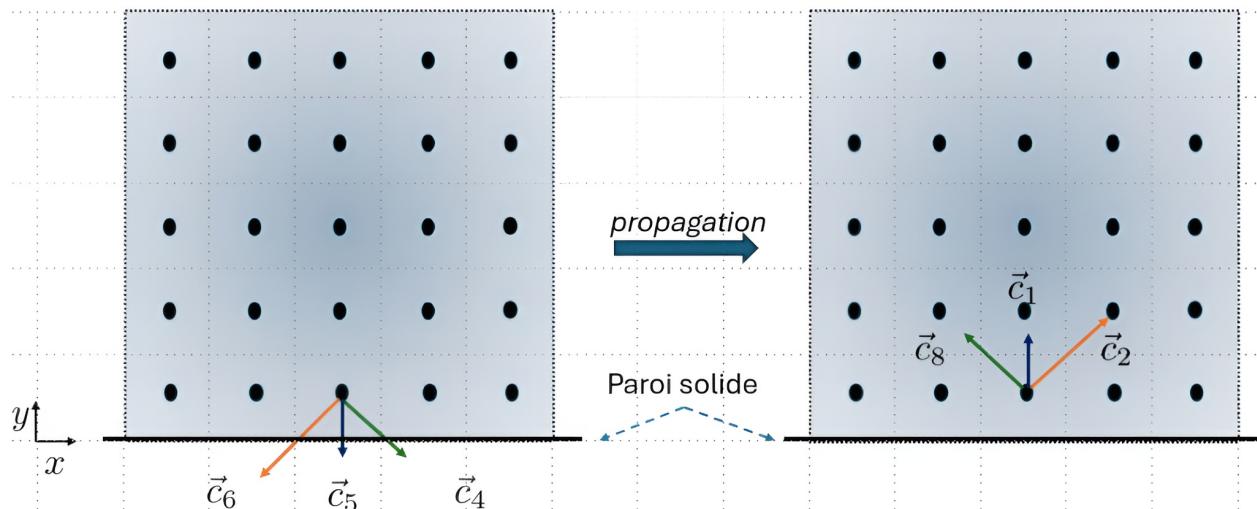


FIGURE A.3 Illustration des conditions limites de rebond à mi-chemin (*Halfway bounce-back*) à la suite de propagation sur une frontière perpendiculaire à l'axe x

ANNEXE B DIAGRAMMES DESCRIPTIFS DES MODÈLES CGM I ET CGM II

Une description schématique de certains éléments principaux pour le processus de collision-propagation de **CGM I** est présentée dans la Figure B.1. Les principales étapes sont appliquées à chaque fluide k .

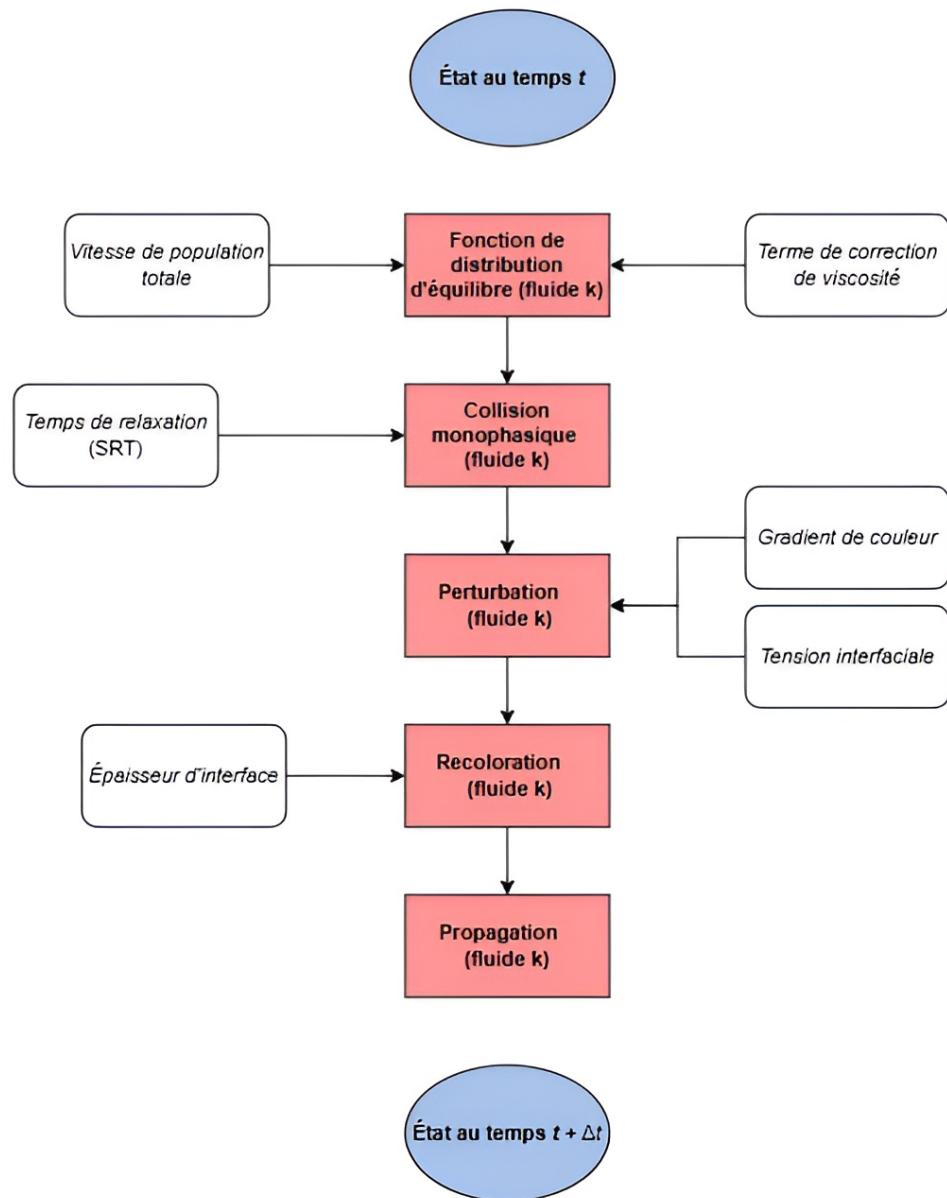


FIGURE B.1 Modèle CGM I

Une deuxième description schématique de certains éléments principaux des étapes de collision-propagation du modèle **CGM II** est présentée dans la Figure B.2. Les principales étapes sont appliquées à la population sans couleur.

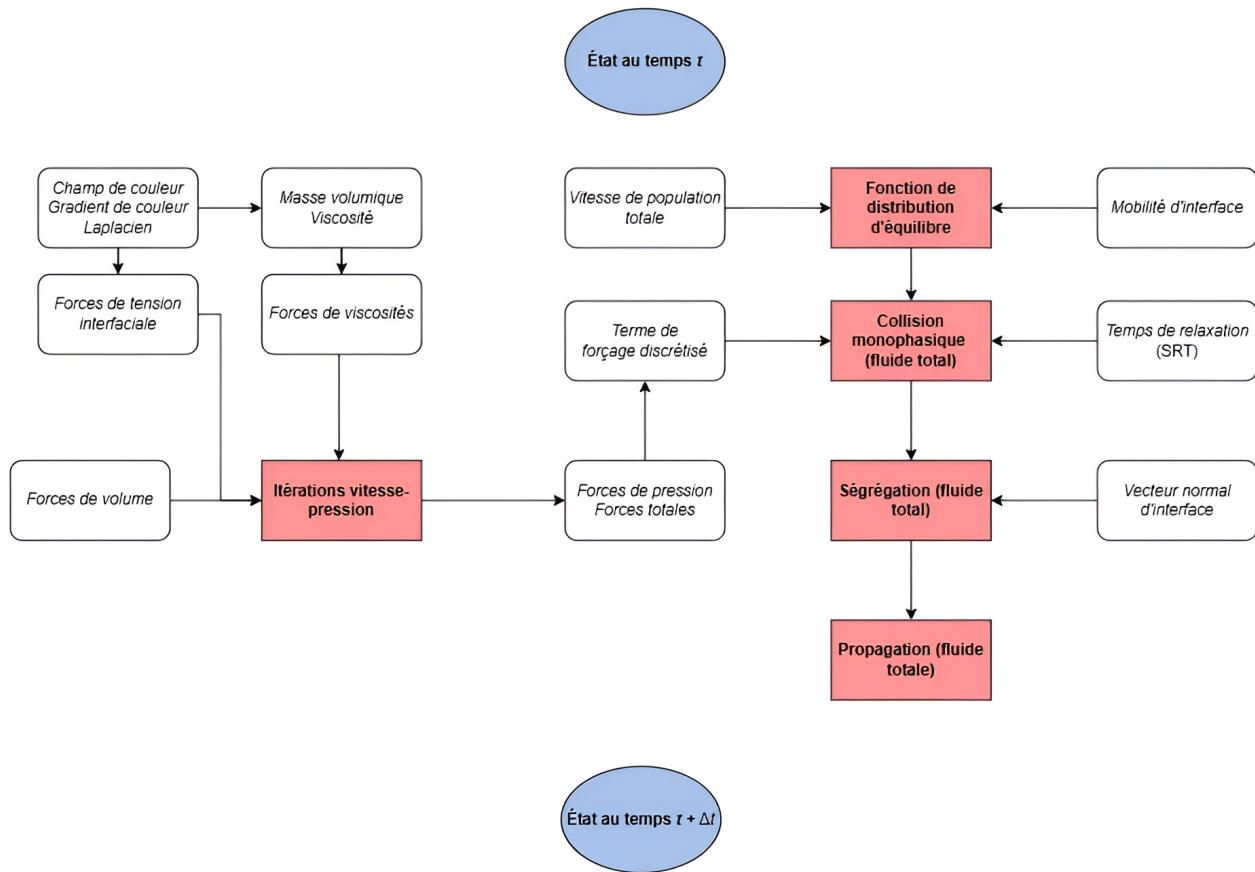


FIGURE B.2 Modèle CGM II

ANNEXE C APPROXIMATION DU CALCUL DU GRADIENT DU CHAMP DU COULEUR ET DE SON LAPLACIEN DANS LE MODÈLE CGM EN PRÉSENCE DE MOUILLABILITÉ

L'évaluation du gradient de couleur et du Laplacien du champ de couleur au voisinage des frontières solides nécessite l'utilisation d'autres équations que 4.22 et 4.46. Le choix proposé correspond aux équations du schéma de différences finies d'ordre 2 suivantes.

Dérivées premières (pour le gradient de couleur)

Centré (Centered) :

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (\text{C.1})$$

Avant (Forward) :

$$f'(x) = \frac{-3f(x) + 4f(x + \Delta x) - f(x + 2\Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (\text{C.2})$$

Arrière (Backward) :

$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x - \Delta x) + f(x - 2\Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (\text{C.3})$$

Dérivées secondes (pour le Laplacien du champ de couleur)

Centré (Centered) :

$$f''(x) = \frac{f(x + \Delta x) + f(x - \Delta x) - 2f(x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (\text{C.4})$$

Avant (Forward) :

$$f''(x) = \frac{2f(x) - 5f(x + \Delta x) + 4f(x + 2\Delta x) - f(x + 3\Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (\text{C.5})$$

Arrière (Backward) :

$$f''(x) = \frac{2f(x) - 5f(x - \Delta x) + 4f(x - 2\Delta x) - f(x - 3\Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (\text{C.6})$$

ANNEXE D VÉRIFICATION DE L'ORIENTATION DU GRADIENT DU CHAMP DE COULEUR POUR LE CAS D'ANGLE STATIQUE 2D

Avant d'imposer différents angles de contact, il est proposé de visualiser sur la Figure D.1 l'orientation des vecteurs de gradient de couleur, afin de valider sa compatibilité avec la technique Akai *et al.* [46]. Les vecteurs doivent être orientés vers l'intérieur de la gouttelette, puisque dans les deux modèles CGM, les valeurs les plus élevées du champ de couleur désignent la gouttelette.

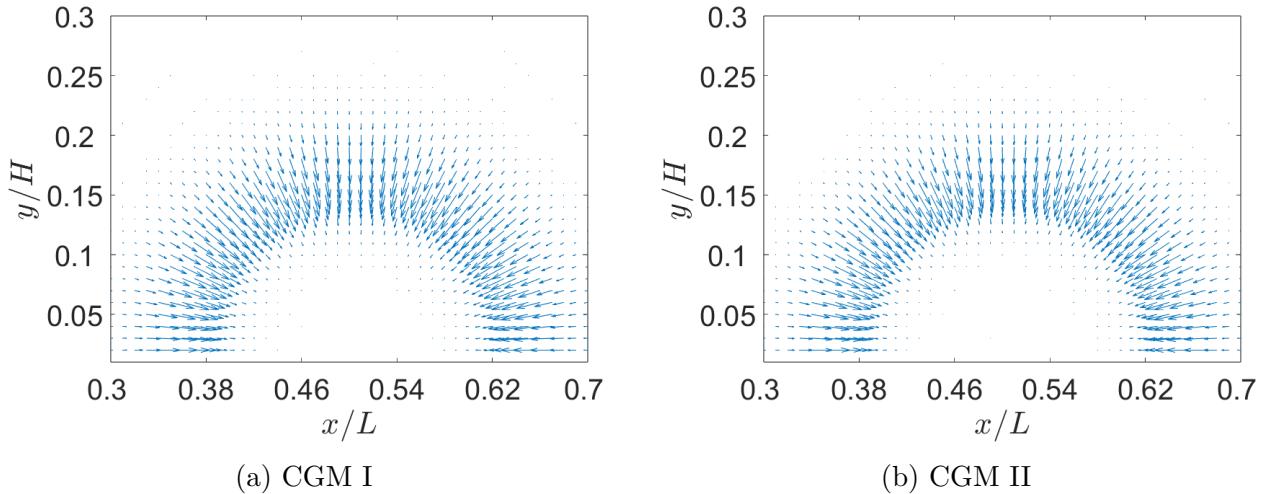


FIGURE D.1 Graphiques du champ de gradient de couleur utilisant la CGM avec un angle de contact de 90° . Le domaine spatial discréteisé est : $(nx \times ny) = (100 \times 30)$. Les lignes solides sont cachées pour fins de visualisation des vecteurs

ANNEXE E VÉRIFICATION DE CONSERVATION DE LA MASSE

Cette section comprend une brève vérification de l'évolution de la masse pour les deux modèles CGM. Le cas étudié est celui de la section 6.3.2. Il s'agit d'un cas avec un faible rapport de masses volumiques $\lambda = 3.6$ et un rapport de viscosités cinématiques unitaire. La quantité d'intérêt est la masse volumique de la phase h . Les valeurs algorithmiques incluent le nombre de noeuds. La Figure E.1 montre que les pertes de masse sont minimales, voire nulles, pour

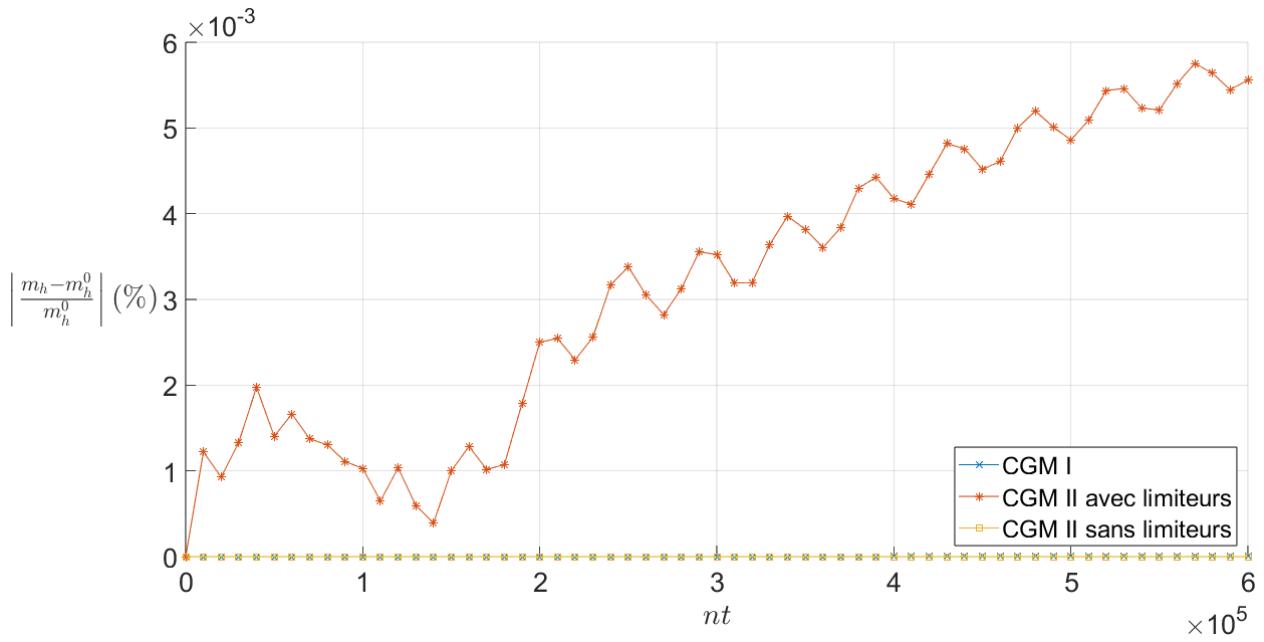


FIGURE E.1 Erreur relative en % de la masse volumique au cours du temps en unités LBM, pour les deux modèles CGM. La quantité m , calculée comme dans l'équation 6.1, indique la masse de la gouttelette à un pas de temps LBM donné, normalisée par sa valeur de masse volumique initiale $\rho_h^0 = 3.6$. Le **CGM II** sans limiteurs est également représenté. Il est à noter que l'erreur est inférieure à $6 \times 10^{-3} \%$ pour **CGM II** avec limiteurs, ce qui indique une faible perte de conservativité

les modèles **CGM I** et **CGM II**. Il convient de rappeler que les limiteurs *min* et *max* ont été utilisés dans le modèle **CGM II** pour maintenir une plage limitée pour les valeurs du champ de couleur, ce qui aide à maintenir la stabilité numérique. Il peut donc être conclu que la masse est préservée même avec les limiteurs, si une petite tolérance (moins de 0.01%) est acceptée.