



HAL
open science

**Développement d'une approche de type LES pour la
simulation d'écoulements diphasiques avec interface.
Application à l'atomisation primaire.**

Pierre Trontin

► **To cite this version:**

Pierre Trontin. Développement d'une approche de type LES pour la simulation d'écoulements diphasiques avec interface. Application à l'atomisation primaire.. Physique [physics]. Ecole nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace, 2009. Français. NNT: . tel-00499373

HAL Id: tel-00499373

<https://theses.hal.science/tel-00499373>

Submitted on 9 Jul 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace
Spécialité : Dynamique des fluides

Présentée et soutenue par Pierre TRONTIN

le 26 Novembre 2009

Développement d'une approche de type LES pour la simulation d'écoulements diphasiques avec interface. Application à l'atomisation primaire.

JURY

D. Legendre	Professeur, IMFT Toulouse	Président du jury
A. Berlemont	Directeur de recherche CNRS, CORIA Rouen	Rapporteur
S. Zaleski	Professeur, UPMC Paris	Rapporteur
JP. Caltagirone	Professeur, Université de Bordeaux	Directeur de thèse
JL. Estivalezes	Maître de recherche, ONERA	Co-directeur de thèse
S. Vincent	Maître de conférence, Université de Bordeaux	Examineur

École doctorale : Aéronautique Astronautique
Unité de recherche : ONERA, centre de Toulouse

Résumé/Abstract

Alors que la simulation aux grandes échelles (L.E.S.) des écoulements monophasiques est largement répandue même dans le monde industriel, ce n'est pas le cas pour la L.E.S. d'écoulements diphasiques avec interface (c'est-à-dire d'écoulements où les deux phases liquide et gazeuse sont séparées par une interface). La difficulté majeure réside dans le développement de modèles de sous-maille adaptés au caractère diphasique de l'écoulement. Le but de ce travail est de générer une base D.N.S. dans le cadre d'écoulements diphasiques turbulents avec interface pour comprendre les interactions entre les petites échelles turbulentes et l'interface. Les différents termes sous-maille proviendront d'une analyse *a priori* de cette base D.N.S. Pour mener à bien ce travail, différentes techniques numériques sont testées et comparées dans le cadre de configurations turbulentes où de grandes déformations interfaciales apparaissent. Puis, l'interaction interface/turbulence est étudiée dans le cadre où les deux phases, séparées par une interface largement déformée, sont résolues par une approche D.N.S. La configuration retenue est l'interaction entre une nappe initialement plane et une T.H.I. libre. Les rapports de densités et de viscosités sont fixés à 1 pour se concentrer sur l'effet du coefficient de tension de surface. Une étude paramétrique sur le nombre de Weber W_e est menée. Finalement, un filtrage *a priori* de la base D.N.S. est réalisé et les termes sous-maille qui en découlent sont comparés les uns aux autres.

Whereas Large Eddy Simulation (L.E.S.) of single-phase flows is already widely used in the CFD world, even for industrial applications, L.E.S. of two-phase interfacial flows, i.e. two-phase flows where an interface separates liquid and gas phases, still remains a challenging task. The main issue is the development of subgrid scale models well suited for two-phase interfacial flows. The aim of this work is to generate a detailed D.N.S. database of incompressible two-phase interfacial flows in order to clearly understand interactions between small turbulent scales and the interface separating the two phases. The different subgrid scale terms derive from an *a priori* analysis of this D.N.S. database. To do this, different numerical techniques are firstly compared to find which methods are well adapted to deal with turbulent configurations where large interfacial deformations occur. Then, the interface/turbulence interaction is studied in the configuration where the interface is widely deformed and where both phases are resolved by D.N.S. The interaction between an initially plane interface and a freely decaying homogeneous isotropic turbulence (H.I.T.) is studied. The densities and viscosities are the same for both phases in order to focus on the effect of the surface tension coefficient. A parametric study based on the Weber number (W_e) is performed. Finally, an *a priori* study is carried out where the different subgrid scale terms derive from the filtering of the D.N.S. database.



Remerciements

Tout d'abord, je remercie Jean Cousteix et Pierre Millan, directeurs de l'ONERA/DMAE, pour m'avoir accueilli dans leur laboratoire et m'avoir permis de mener à bien mes travaux de thèse dans d'excellentes conditions. Du côté bordelais, merci à Jean-Paul Caltagirone, mon directeur de thèse, pour avoir toujours fait en sorte que je me sente "à la maison" lors de mes séjours au TREFLE.

Je tiens à remercier tout particulièrement deux personnes sans qui cette thèse n'aurait jamais été ce qu'elle est. Tout d'abord, mon co-directeur de thèse, Jean-Luc Estivalezes. Tout en assurant parfaitement son rôle d'encadrant pour l'apprenti-chercheur que je suis, il a su me laisser une grande part de liberté dans mes travaux. L'ambiance de travail, basée sur la confiance réciproque entre Jean-Luc et moi, m'a permis de gagner en autonomie. Je voulais aussi remercier très chaleureusement Stephane Vincent. Sa rigueur, sa disponibilité et sa passion ont été moteur tout au long de ma thèse. Merci aussi Stephane pour tes relectures très pointilleuses de mes papiers et de ce manuscrit.

Merci à tous les thésards que j'ai cotoyés : Davide, Bernhard, Madjid, Nico, Nechtan, Loïc, Vincent, Brice, Géraldine, Vital, Jegan, Jorge, ... Une dédicace spéciale à mon pote et collègue Pr Cédric Corre. Ces trois années auraient été bien différentes sans sa joie de vivre et sa bonne humeur.

Merci aussi à tous ceux qui m'ont soutenu et aux personnes que j'ai rencontrées : ma famille, Pascale, les potes du Toulouse triathlon, ...

Enfin, merci à Jean-Marie Le Gouez et Vincent Couaillier de l'ONERA/DSNA pour me permettre de continuer l'aventure!



Table des matières

Introduction	1
I Modèles et méthodes numériques	21
1 Modèle physique et présentation des équations	25
1.1 Equations de conservation de la masse et de quantité de mouvement	26
1.2 L'hypothèse d'incompressibilité	27
1.3 Hypothèse de fluide newtonien	28
1.4 Le découplage vitesse/pression	28
1.4.1 Méthode de projection	28
1.4.2 Méthode du lagrangien augmenté	29
1.5 Les équations pour les écoulements multiphasiques	30
1.5.1 La tension superficielle	30
1.5.2 Conditions de saut à travers une interface : cas général	31
2 Les méthodes de capture d'interface	33
2.1 Les méthodes de front-tracking	34
2.2 Les méthodes de front-capturing	37
2.2.1 Méthodes VOF	37
2.2.2 Les méthodes level-set	41
3 La discrétisation spatiale de l'équation d'avection de la level-set	47
3.1 Schémas WENO	47
3.1.1 WENO : version non conservative	48
3.1.2 WENO : version conservative	50
3.2 Schémas spectraux : formulation volumes finis	52
3.2.1 Présentation générale	52
3.2.2 Détail de la méthode dans le cas 1D	54
3.3 Schémas spectraux : formulation différences finies	57
4 Méthode hybride de capture d'interface : couplage level-set/particules	61
4.1 Présentation de la méthode	62
4.2 L'interpolation cubique par spline	63
4.3 Fragmentation et coalescence de l'interface	66
4.4 Reconstruction de l'interface	67
4.4.1 Reconstruction à partir de la distance euclidienne	67

TABLE DES MATIÈRES

4.4.2	La méthode de fast marching	69
4.4.3	Performance de la méthode fast marching en terme de CPU	72
4.5	Le calcul de la courbure	72
5	Validation des différentes méthodes de capture d'interface	79
5.1	Advection du disque de Zalesak	81
5.2	Déformation d'un disque par un tourbillon (cas test du serpent)	91
5.3	Conclusions sur les méthodes de suivi d'interface	98
6	Couplage Navier-Stokes/méthode de suivi d'interface : traitement des conditions de saut	101
6.1	Présentation des techniques de traitement des sauts à l'interface	102
6.1.1	Méthode CSF	102
6.1.2	Méthode ghost-fluid	103
6.1.3	Méthode par application de la première formule de Frenet	106
6.2	Comparaison des solveurs monophasiques entre Thetis et Dyjeat	107
6.2.1	Tourbillon de Taylor-Green	107
6.3	Etude de différents couplages de méthodes de suivi d'interface avec différentes techniques de traitement des sauts à l'interface	108
6.3.1	Quelques remarques à propos des méthodes retenues	108
6.3.2	Cas test de Prosperetti	110
6.3.3	Cas test de la bulle statique : mesure des courants parasites	115
6.3.4	Rupture de barrage sur fond mouillé	118
6.4	Conclusions	120
II	D.N.S. de l'interaction interface/turbulence	123
7	La turbulence en quelques mots	127
7.1	Approche corrélatrice de la turbulence	129
7.1.1	Fonctions de corrélation	130
7.1.2	Analyse asymptotique de f et g : échelles de Taylor	131
7.1.3	Caractérisation des échelles dissipatives	133
7.2	Approche spectrale de la turbulence	134
7.2.1	Tenseur spectral	134
7.2.2	Spectre d'énergie $E(k)$	134
7.2.3	Conclusion	135
8	T.H.I. monphasique : génération et validation	137
8.1	Spectre d'énergie initial	137
8.1.1	Génération du spectre	138
8.1.2	Présentation du spectre retenu et validations	139
8.2	DNS de la T.H.I. monphasique	144
8.2.1	Problématiques liées aux DNS hautement résolues	149

9	Interaction d'une nappe avec le champ de THI	153
9.1	Configuration	155
9.2	Interaction interface/turbulence : Résultats généraux	156
9.2.1	Analyse qualitative	156
9.2.2	PDF de la distribution des tailles de gouttes	156
9.2.3	Bilan d'énergie cinétique	160
9.2.4	Evolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente : influence du nombre de Weber	163
9.3	Statistiques sur la turbulence. Réorganisation intercomposantes de l'énergie cinétique turbulente	165
9.3.1	Analyse aux temps courts des tensions de Reynolds $t/T_e \leq 2$	169
9.3.2	Analyse aux temps longs des tensions de Reynolds $t/T_e \geq 5$	172
9.4	Spectres d'énergie 3D	173
9.5	Prise en compte de la distance à l'interface et spectres d'énergie 2D	178
10	Conclusion sur la partie	183
III	Analyse <i>a priori</i> des DNS	185
11	Filtrage des équations conditionné par la phase	189
11.1	Le problème du filtrage classique en présence d'une discontinuité	189
11.1.1	Présentation du filtrage classique	189
11.1.2	Contribution sous-maille du saut lié à la discontinuité	191
11.2	Filtrage des équations conditionné par la phase	192
11.3	Filtrage de l'équation d'advection de la level-set	194
12	Filtrage <i>a priori</i> des DNS	195
12.1	Paramètres du filtrage	195
12.2	Filtrage <i>a priori</i> et résultats	196
13	Fermeture et modélisation des termes de sous-maille	201
13.1	Modélisation fonctionnelle	202
13.1.1	Modèles basés sur les échelles résolues	203
13.1.2	Modèles basés sur l'énergie à la coupure	204
13.1.3	Modèles basés sur les échelles sous-maille	204
13.1.4	Présentation de quelques modèles	205
13.1.5	Amélioration des modèles dans l'espace physique	208
13.2	Modélisation structurelle	210
13.2.1	Développements formels en série	210
13.2.2	Modèle à équations de transport	211
13.2.3	Modèles déterministes des structures sous-maille	212
13.2.4	Modèles basés sur l'hypothèse de similarité d'échelles	212
13.3	Modélisation mixte	214
13.4	Modélisation des tenseurs τ_k et τ_ϕ	215
13.5	Conclusion	218

Conclusion	221
A Transformée de Fourier rapide ou FFT	225
A.1 Intérêt de la FFT	225
A.2 Principe de la FFT 1D	226
A.3 Extension aux cas 2D et 3D	227
B Extraction de composantes connexes par arcs	229
B.1 Rappels mathématiques	229
B.2 Opérations géodésiques	230
B.2.1 Élément structurant	230
B.2.2 Dilatation géodésique	231
B.2.3 Reconstruction géodésique	232
B.3 Algorithme de reconstruction géodésique	232

Introduction

Que ce soit à très grande échelle comme en météorologie, en océanographie ou en astrophysique ou bien alors à plus petite échelle comme en aéronautique, en automobile, ou même en biologie, la mécanique des fluides a de nombreuses applications et beaucoup de phénomènes restent mal compris. Parmi ces configurations, les écoulements diphasiques turbulents sont très répandus et dans des domaines variés. En milieu naturel, l'océan et l'atmosphère échangent constamment de l'énergie. Ces transferts se font sous forme de radiation infrarouge, d'évaporation ou de condensation. La friction du vent intervient aussi dans cet échange d'énergie. Le phénomène de déferlement des vagues illustre la coexistence d'échelles de différentes tailles au sein d'un écoulement diphasique turbulent. Sur la figure 1, on peut voir une vague qui déferle à l'approche des côtes. Différentes structures de tailles différentes coexistent. On trouve les plus petites dans l'écume de la vague. La plus grosse structure étant évidemment le rouleau en lui-même. Sur le plan de la turbulence, le



FIGURE 1 – Déferlement d'une vague. Plusieurs structures de tailles différentes sont visibles : des plus petites (écume) aux plus grosses (le rouleau)

déferlement génère de la vorticit   à grande échelle [9]. Lorsque la vague plonge, une grande quantité de turbulence est g  n  r  e et la vague est donc le si  ge d'un   coulement diphasique turbulent multi-  chelles o   les interactions entre les deux phases sont importantes. Dans l'industrie, les *pipelines* et le milieu p  trolier sont le si  ge d'  coulements diphasiques turbulents lors de forages notamment. En effet, lors de l'extraction des champs d'hydrocarbures, les fluides sont compos  s d'un m  lange de p  trole, de gaz et d'eau parfois accompagn   de particules solides. Ce fluide est le si  ge d'instabilit  s d'  coulement et des difficult  s peuvent appara  tre lors du transport sur de grandes distances. Les changements de phase et la turbulence jouent un r  le important dans de nombreux secteurs, notamment la plasturgie, la

métallurgie, les piles à combustibles, etc. Dans les échangeurs thermiques (évaporateurs et condenseurs), le taux de turbulence de l'écoulement est directement relié à la qualité de l'échange thermique. Par exemple, le générateur de vapeur d'une centrale nucléaire est le siège d'écoulements multiphasiques turbulents et instationnaires. Comprendre la physique de tels écoulements a des conséquences directes sur le rendement du générateur. Les écoulements diphasiques et turbulents sont présents dans les chambres de combustion lors de l'injection de carburant, puis lors de la combustion de ce dernier. Dans un turboréacteur, le contrôle du mélange diphasique air/kérosène est une des principales difficultés rencontrées lors de la conception du moteur. En effet, la quantité des émissions polluantes est directement reliée à la qualité du mélange de pré-combustion. De plus, ce mélange sera d'autant meilleur qu'il est constitué de petites gouttes. L'enjeu est donc de faire passer une masse compacte de kérosène en une multitude de gouttelettes : c'est le phénomène d'atomisation du jet de carburant. La présence de gouttelettes est aussi favorable à une meilleure combustion puisque la surface de contact entre l'air et le carburant est augmentée. La fragmentation d'un jet liquide en gouttelettes reste mal comprise. En effet, la réalisation de mesures expérimentales directes est rendue difficile tant les montées en pression et température sont importantes à l'intérieur d'une chambre de combustion. L'outil numérique est un complément aux lacunes des expériences. Un des grands objectifs serait, à terme, de simuler une chambre de combustion depuis l'injection de carburant jusqu'au rejet des gaz d'échappements. Avant qu'une chambre de combustion numérique voie le jour, beaucoup de phénomènes physiques nous échappent encore. Parmi eux, le phénomène d'atomisation et le contrôle de la taille des gouttes. De même, la combustion du mélange reste un thème de recherche majeur. En effet, la combustion met en jeu des écoulements diphasiques, instationnaires et turbulents, et leur simulation numérique systématique n'est pas encore d'actualité pour l'industrie. Dans ce vaste projet, ce mémoire de thèse s'intéresse à la désintégration d'un jet liquide. Le but est de comprendre les échanges entre les deux phases dans le cas où la surface d'échange entre l'air et le kérosène présente des structures de taille diverses, de la nappe qui oscille à basse fréquence jusqu'aux plus petites gouttelettes, en passant par la formation de filaments.

La désintégration d'un jet liquide

Le spray qui naît de la désintégration d'un jet liquide est généré grâce à un injecteur. Les deux plus connus sont les injecteurs pression et les injecteurs aéromécaniques.

Le principe d'un injecteur pression est très simple. Le liquide est injecté à haute pression au travers d'un petit orifice, ce qui provoque son atomisation. Sa mise en oeuvre est simple mais limitée aux cas où il est possible d'imposer une forte pression en amont de l'injecteur.

L'injecteur pression ne supporte pas de forts débits de carburant, donc il n'est pas adapté pour les turbomachines de l'aéronautique. Les injecteurs aéromécaniques autorisent un fort débit de carburant entrant. Dans un tel injecteur, l'atomisation est réalisée par cisaillement du jet de carburant par un écoulement d'air à haute vitesse périphérique (dit co-courant). La figure 2(a) représente un injecteur coaxial. Le jet d'oxygène liquide (*LOX*) est cisailé par un jet gazeux à haute vitesse d'hydrogène gazeux (*GH₂*). Le jet de *LOX* se désintègre avec les phénomènes d'atomisation. La désintégration du jet liquide et l'atomisation peuvent être divisées en deux régions : une région amont où l'atomisation primaire se manifeste et une région plus en aval où l'on retrouve l'atomisation secondaire. L'atomisation primaire domine

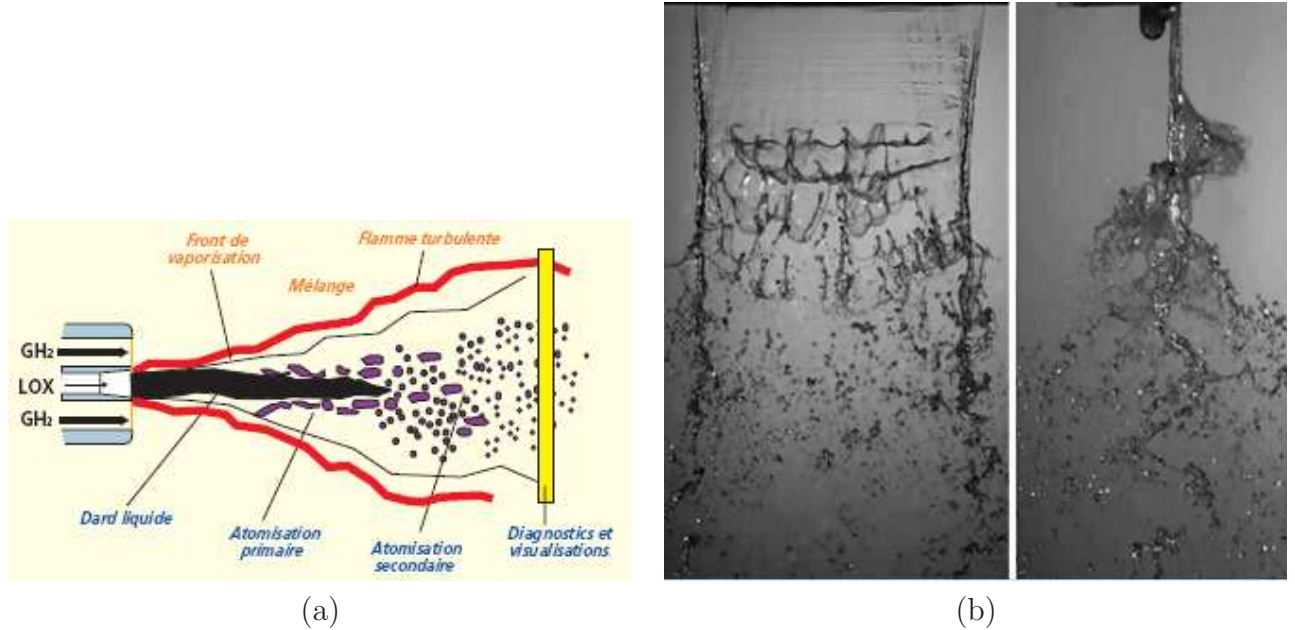


FIGURE 2 – (a) : Phénomènes physiques mis en jeu dans une flamme d’injecteur coaxial cryotechnique. (b) : Injection en géométrie plane. Images ONERA.

à la sortie de l’injecteur (sur quelques diamètres de l’injecteur). Elle est principalement due aux instabilités de cisaillement, et le résultat est le déchirement du jet liquide par les contraintes de cisaillement élevées à l’interface gaz/liquide [91]. Plus en aval, l’atomisation des gouttes provient des forces de déformation qui agissent sur les gouttes et qui proviennent de l’écoulement gazeux turbulent en périphérie. C’est le phénomène d’atomisation secondaire. La déstabilisation du jet liquide à la sortie de l’injecteur est due à une instabilité du type Kelvin-Helmholtz où la tension de surface agit comme une force stabilisante. La figure 2(b) représente les deux types d’atomisation.

Configuration du jet plan

La configuration de nappe plane liquide cisailée par un contre-courant d’air va être présentée. C’est en effet cette configuration qui a été la plus largement utilisée tant sur le plan expérimental que pour des études de stabilité. Le principe de fonctionnement est représenté sur la figure 3. Le liquide est injecté entre les deux parois parallèles d’un injecteur. $2a$ représente l’épaisseur de la nappe liquide, e l’épaisseur de la couche d’air cisailante et δ représente la taille de la couche limite dans l’écoulement d’air. Les injecteurs commerciaux que l’on retrouve dans les moteurs aéronautiques sont la plupart du temps axisymétriques. Mais, que la géométrie soit plane ou axisymétrique, les mécanismes de l’injecteur demeurent les mêmes. Dans le but de réaliser des études et des mesures sur l’injecteur, la configuration plane simplifie la visualisation et l’accès aux mesures. Le mécanisme de désintégration dépend de plusieurs paramètres comme : la tension de surface, la viscosités des deux fluides, l’épaisseur de la nappe de liquide et la vitesse relative liquide/gaz. Voir par exemple les travaux précurseurs de Stapper [137, 138] et Chigier [90, 91]. Afin d’étudier les effets des propriétés du liquide, plusieurs liquides sont utilisés notamment pour quantifier le rôle du

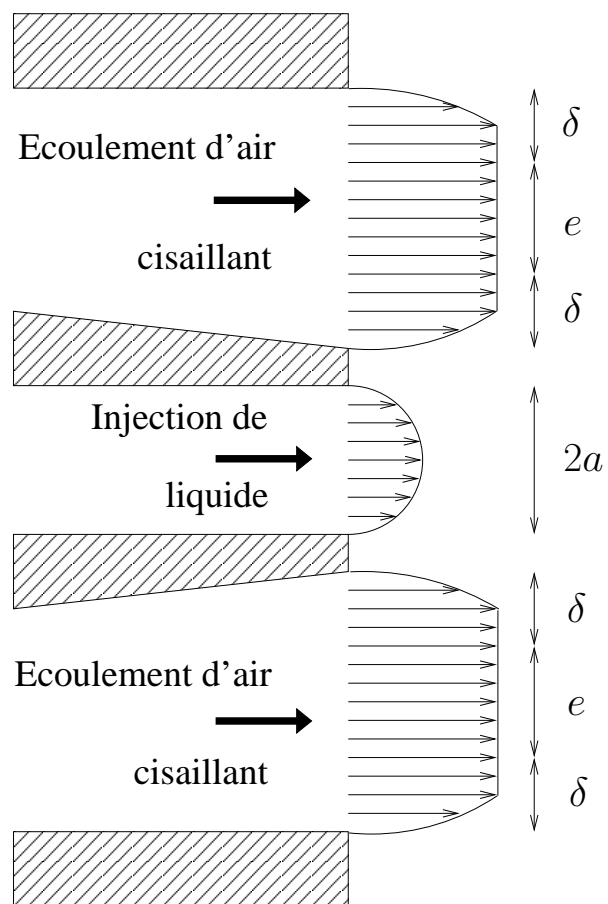


FIGURE 3 – Configuration de la désintégration assistée d'une nappe de liquide par un courant gazeux de part et d'autre.

couple viscosité/tension de surface sur les différentes échelles mises en jeu dans le processus de fragmentation du jet. Le but ultime étant de pouvoir prévoir la PDF de la taille des gouttes qui forment le spray après atomisation. L'ordre de grandeur des différents paramètres est le suivant :

$$\begin{cases} 2a = 200 \mu m \text{ à } 1 mm \\ V_l = 1 \text{ à } 5 m.s^{-1} \\ V_g = 15 \text{ à } 60 m.s^{-1} \end{cases}$$

où V_g et V_l sont respectivement les vitesses du gaz et du liquide.

Un peu de stabilité linéaire

Les premiers calculs de stabilité linéaire temporelle des équations de Navier-Stokes incompressibles en 2D sur une configuration de nappe liquide non visqueuse dans de l'air au repos ont été menées par Squire [136], York [173], Taylor [146] et Hagerty [44]. Il apparaît que seulement deux modes d'oscillation peuvent croître à la surface d'une nappe liquide : le mode sinueux (antisymétrique) et le mode variqueux (dilatationnel ou symétrique). Voir la figure 4 pour une représentation de ces modes. La viscosité joue un rôle multiple dans les

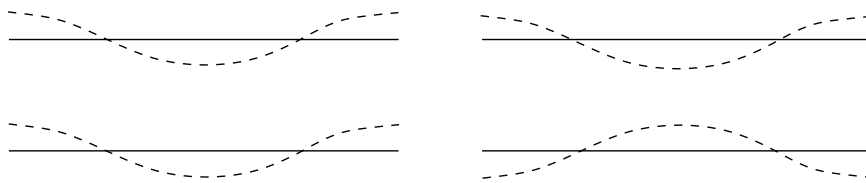


FIGURE 4 – Mode sinueux (à gauche) et mode variqueux (à droite).

mécanismes d'instabilité. Elle conduit à un élargissement de la gamme des nombres d'onde pour lesquels la nappe liquide est instable. Le mécanisme qui mène la nappe de l'oscillation jusqu'à la fragmentation n'est pas trivial. En effet, de fortes déformations de l'interface sont observées lorsqu'une nappe se met à osciller suivant un mode sinueux. D'après la figure 4, un tel mode ne peut pas, à lui seul, expliquer les brisures de la nappe. En effet, les deux frontières de l'interface restent "parallèles". La réponse peut être trouvée dans les études de stabilité non linéaire de Jazayeri [56] ou Rangel [119]. La première harmonique du mode sinueux est un mode variqueux qui peut provoquer un pincement de l'épaisseur de la nappe jusqu'à entraîner sa coupure. S'ensuit alors le commencement du processus de désintégration de la nappe.

Mécanisme de désintégration : de l'atomisation primaire à la formation du spray

Dans [91], Chigier détermine trois régimes différents pour le mécanisme de désintégration d'une nappe. La figure 5 représente la fréquence d'oscillation de la nappe liquide pour différentes vitesses de la nappe liquide. Trois sous-régions distinctes sont séparées par les sauts en pression. La fréquence des oscillations de la nappe liquide subit des sauts raides mais continus lorsque la vitesse du fluide est augmentée. Ces sauts se déplacent vers la

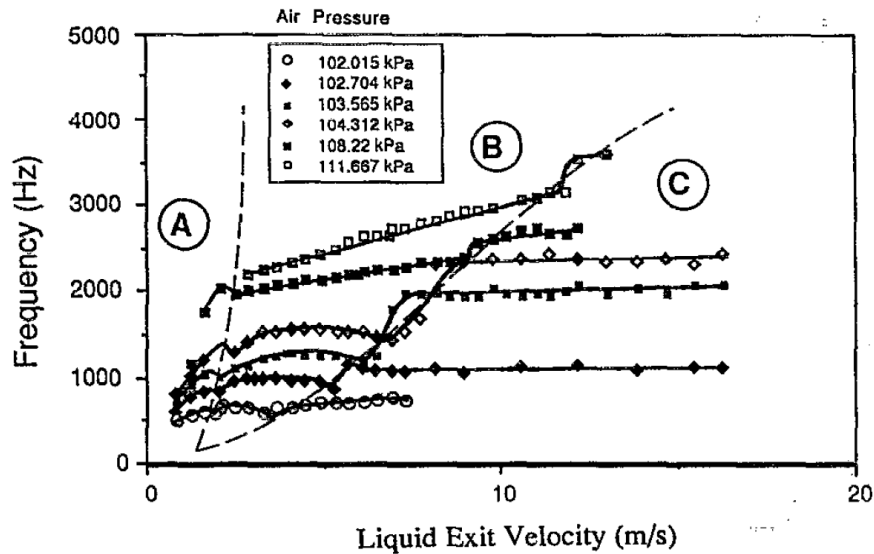


FIGURE 5 – Diagramme des fréquences d’oscillation globale d’une nappe de liquide cisailée en fonction de la vitesse. D’après Chigier [91], repris par Couderc [26].

droite quand la vitesse de l’air augmente. Dans les régions A et B, le mode sinueux domine les vibrations de la nappe liquide. Lors de la transition entre B et C, à la fois les modes sinueux et variqueux coexistent. Dans la région C, les oscillations dans la nappe liquide relèvent principalement du mode variqueux.

Dans les régions A et B, il y a une forte corrélation entre la vitesse de l’air et la fréquence de vibration de la nappe : plus la vitesse de l’air est grande, plus la fréquence d’oscillation de la nappe est grande. Cette corrélation n’est pas vérifiée dans la zone C.

La zone B correspond au meilleur régime d’atomisation. On se propose de la détailler à présent. Le mécanisme qui conduit de la nappe plane à la rupture des ligaments est présenté sur le schéma 6. En parallèle, une photographie du mécanisme est présentée. Dans un premier temps, la nappe de liquide subit une instabilité de cisaillement de type Kelvin-Helmholtz, ce qui provoque la croissance rapide d’un mode sinueux. La nappe se met alors à battre comme un drapeau au vent. Cette zone située juste à la sortie de l’injecteur constitue l’atomisation primaire : c’est l’initialisation du processus de désintégration. Ce battement de la nappe se manifeste tout au long de l’atomisation : c’est l’oscillation globale de la nappe liquide. Cette oscillation est responsable d’un lâcher intermittent de gouttes plus en aval de l’injecteur. En aval de l’atomisation primaire, l’oscillation globale est responsable de l’apparition d’ondes de déformations transverses. Sous l’action des forces aérodynamiques, ces ondes dégénèrent en ligaments. Ce phénomène, couplé à l’oscillation globale, provoque la brisure de la nappe en paquets de liquide de tailles plus petites. Ces structures sont elles-mêmes cisailées par l’écoulement d’air extérieur. C’est le processus d’atomisation secondaire qui tend à former des structures de plus en plus petites. L’aboutissement de l’atomisation secondaire est la brisure des gouttes en un spray. L’atomisation secondaire dépend fortement du nombre de Weber aérodynamique.

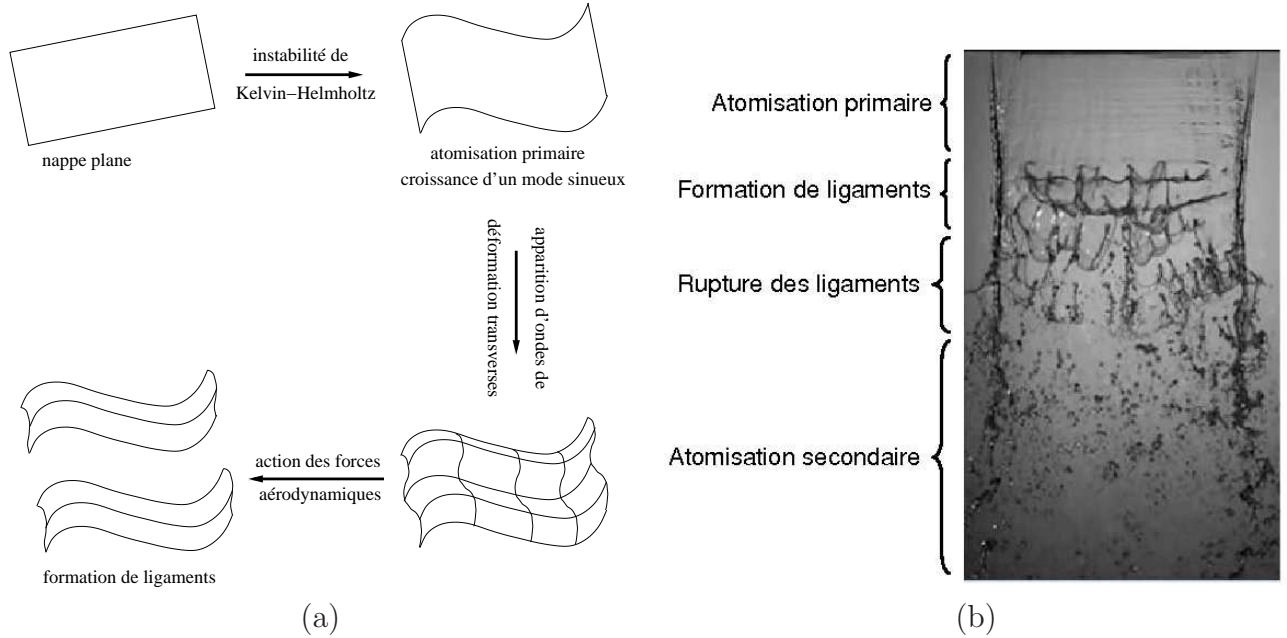


FIGURE 6 – (a) : Principe de formation des ligaments. (b) : Nappe liquide cisailée par un écoulement d’air à haute vitesse. Le régime de désintégration correspond à la zone B définie par Chigier [91]. Réalisé par Carentz [20], Onera.

Quelques résultats sur l’oscillation globale

La fréquence d’oscillation globale varie linéairement avec la vitesse du gaz cisailant. De nombreuses expériences ont validé cette dépendance linéaire. En revanche, la corrélation entre la fréquence d’oscillation globale de la nappe et la vitesse du liquide est nettement moins nette. Ceci est représenté sur la figure 7 qui décrit la fréquence d’oscillation globale de la nappe en fonction de la vitesse d’air cisailant (figure (a)) ou de la vitesse d’eau (figure (b)). La figure est extraite de Lozano [88]. L’examen de la figure 7 semble montrer que les courbes se déduisent les unes des autres par un facteur. D’où la représentation de ces mêmes courbes en fonctions des mêmes paramètres, mais adimensionnés cette fois-ci. Les paramètres couramment utilisés sont les suivants :

$$\begin{cases} M = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2} \\ f^* = \frac{fa}{U_g - U_{min}} \end{cases}$$

où a est l’épaisseur de la nappe liquide (voir figure 3), U_g et U_l respectivement les vitesses de l’air et de la nappe liquide, ρ_g et ρ_l respectivement les masses volumiques de l’air et de l’eau. U_{min} est la vitesse de gaz minimum pour initier le régime d’oscillation globale. M est le rapport de quantités de mouvement. La figure 8 représente la fréquence réduite f^* en fonction de M . D’autres auteurs proposent une formulation différente pour M et f^* où la hauteur de veine d’air intervient. Mais cette hauteur n’est pas la longueur caractéristique pour dimensionner correctement le problème. Il apparaît que ce sont les couches limites qui

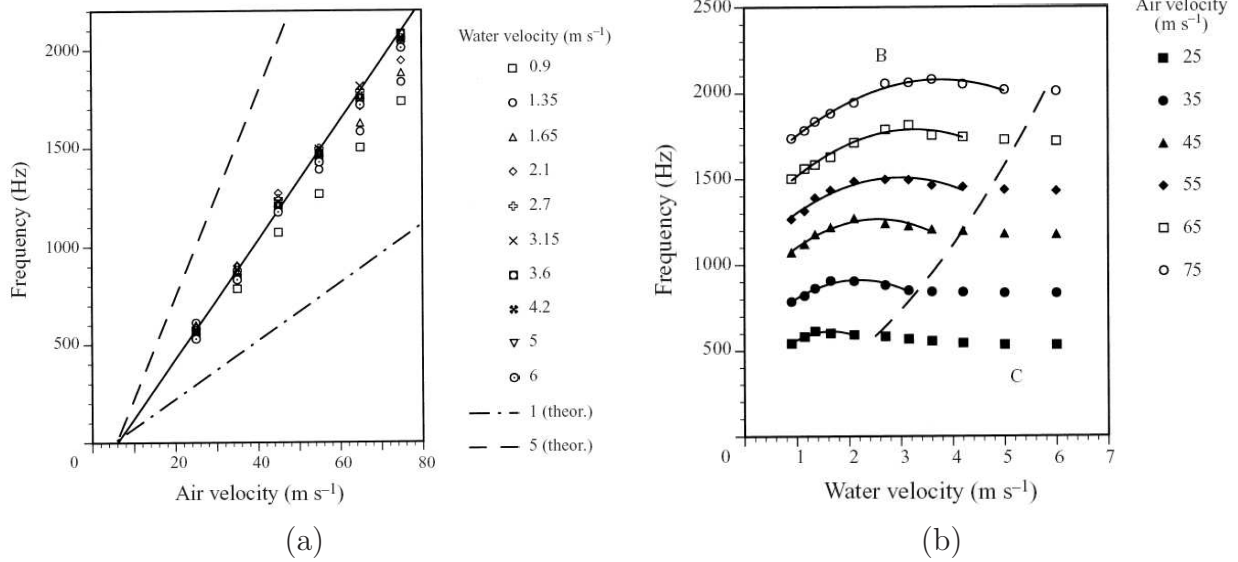


FIGURE 7 – (a) : Mesures de la fréquence d’oscillation globale en fonction de la vitesse de l’air cisailant pour différentes vitesses d’eau. (b) : Mesures de la fréquence d’oscillation globale en fonction de la vitesse de l’eau pour différentes vitesses d’air. A partir de Lozano [88], repris par Couderc [26].

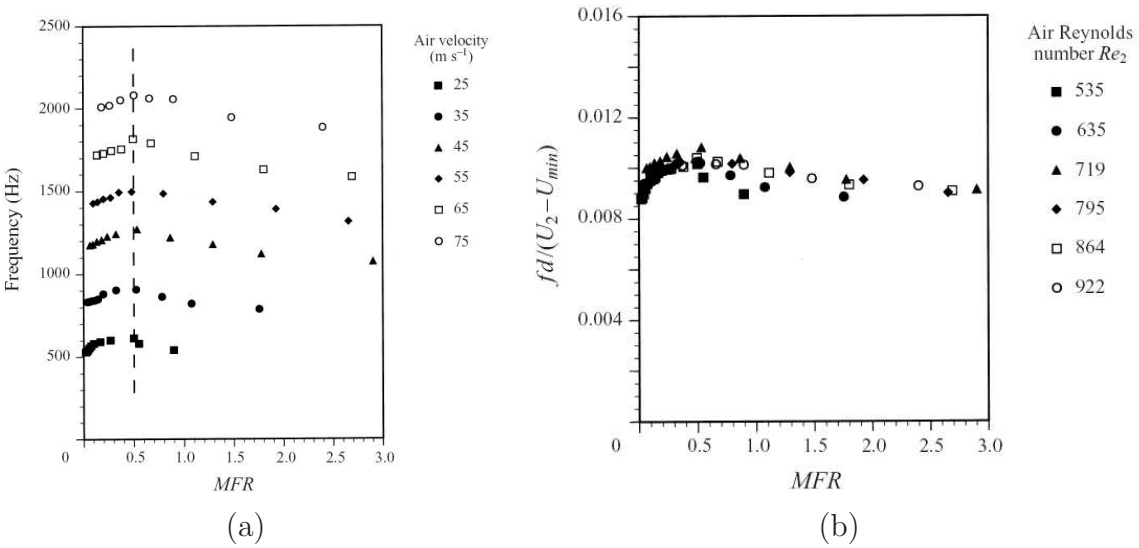


FIGURE 8 – (a) : fréquence d’oscillation globale f en fonction de M . (b) : fréquence d’oscillation globale adimensionnée f^* en fonction de M .

se forment sur les parois à l’aval de l’injecteur qui ont une influence majeure sur l’oscillation globale.

Une augmentation de l’épaisseur de la couche limite provoque une diminution du taux de croissance de l’onde primaire et une diminution du nombre d’onde pour lequel le taux de croissance est maximum. L’épaisseur de la couche limite est souvent de l’ordre de grandeur de l’épaisseur de la nappe liquide. Donc, la prise en compte de profils de vitesse dans le gaz et le liquide est essentielle dans la description des instabilités qui aboutissent à la désintégration du jet. Ainsi, toute étude à viscosité nulle est à exclure.

La désintégration : un phénomène multi-échelles

Le phénomène de désintégration est un phénomène multi-échelles tant sur le plan du champ de vitesses qui est caractérisé par un spectre turbulent que sur le plan interfacial où des ligaments sont créés à partir d’une nappe plane, qui évoluent finalement vers un spray formé d’une multitudes de gouttelettes.

Lors des premiers travaux sur l’atomisation, on a compris que le niveau de turbulence dans le liquide avait un effet sur la stabilité du jet [124]. Phinney [107] a montré que la longueur à partir de laquelle la désintégration du jet a lieu est raccourcie lorsque la nappe liquide passe d’un régime laminaire à un régime turbulent. Lors de l’étude de jets circulaires dans lesquels la turbulence est pleinement développée, Wu *et al.* [171] et Tseng *et al.* [153] ont observé que lorsque la turbulence se développe dans le jet dès sa sortie, cette turbulence devient prédominante et contribue de façon majeure au développement du spray. Les auteurs pensent que cette turbulence joue un rôle majeur sur la déstabilisation du liquide à la sortie de l’injecteur. Selon Tseng [153], la taille des gouttes après l’atomisation primaire est plus importante dans le cas d’un écoulement liquide turbulent que dans le cas non turbulent. Des corrélations ont été établies entre les fluctuations turbulentes, la taille des gouttes et la distance à partir de laquelle la désintégration du jet a lieu. La majorité des modèles qui tentent de prédire l’atomisation d’un liquide ne prennent pas en compte la turbulence du liquide. Pour prendre en compte la turbulence dans le processus d’atomisation à la sortie de l’injecteur d’un modèle Diesel, Huh [55] propose un modèle où les deux mécanismes indépendants (taux de croissance de l’onde et turbulence) sont pris en compte. Il en conclut que la force d’inertie du gaz et les tensions turbulentes sont les deux forces principales qui pilotent l’atomisation telle qu’on la rencontre dans les injecteurs de moteurs Diesel. Toutes ces études montrent que la turbulence est indissociable du mécanisme d’atomisation. La méthode numérique utilisée pour résoudre le processus d’atomisation devra être à même de capter ou bien de modéliser toutes ces échelles turbulentes. Le problème est qu’il n’est pas possible de réaliser une séparation nette entre les échelles. En effet, il est difficile d’isoler un écoulement moyen (statistiquement) sur laquelle viendraient s’ajouter les fluctuations turbulentes. Bien sûr, l’écoulement longitudinal de la nappe liquide peut faire office d’écoulement moyen. Mais on a montré que le mode sinueux croissant longitudinal a tendance à créer un mode variqueux transversal responsable de l’apparition des ligaments. La décomposition entre un écoulement moyen (statistiquement) longitudinal et un écoulement turbulent n’est plus alors si évident. Ainsi, il semble que l’approche RANS n’est peut-être pas adaptée à la simulation du processus d’atomisation (même les variantes instationnaires).

L’aspect multi-échelles du processus d’atomisation est encore plus flagrant pour ce qui relève de l’interface. Sur la figure 9 est représenté le processus d’atomisation d’un jet liquide

par un écoulement d'air cisailant. Les calculs ont été effectués par l'équipe d'Alain Berlemont du Coria. La figure 9(a) représente l'axe du jet. En amont, les ligaments commencent à se

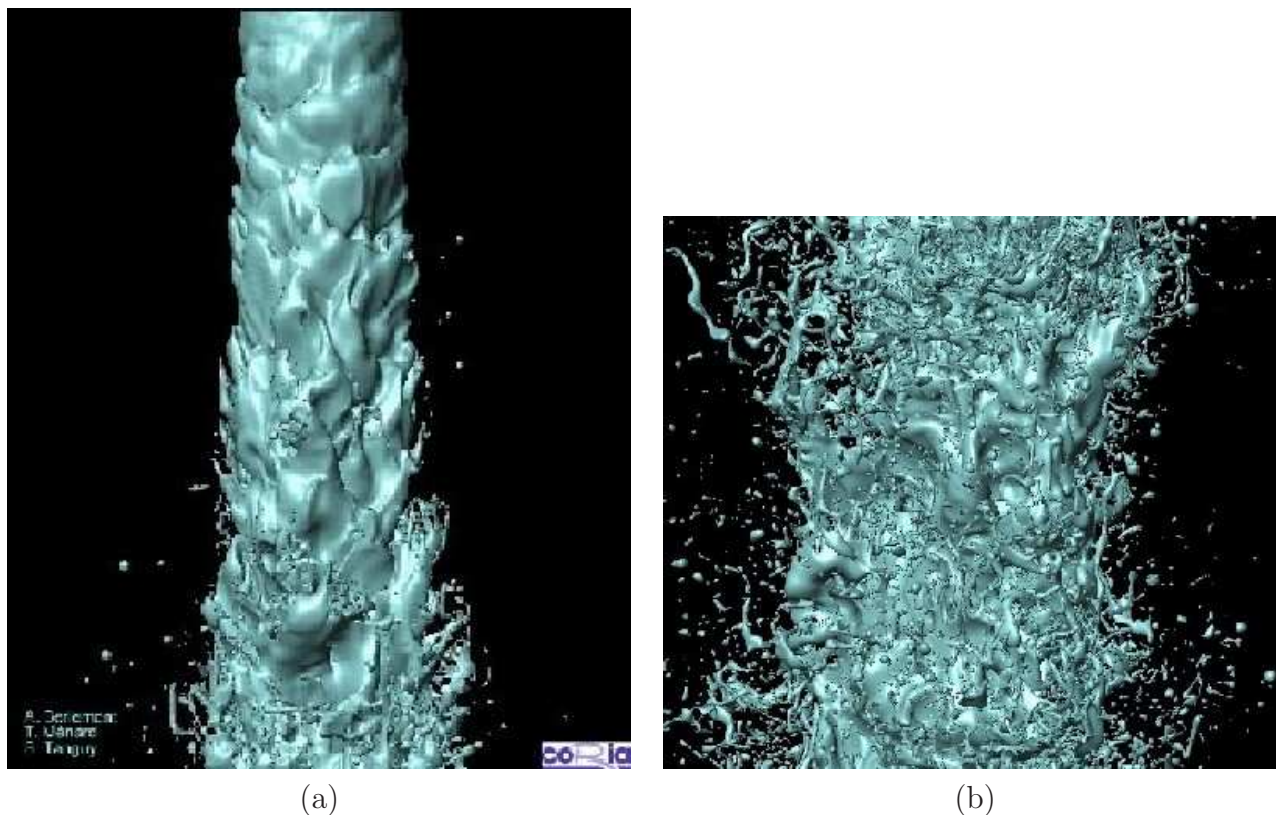


FIGURE 9 – Atomisation d'un jet liquide. $2a = 100 \mu m$, vitesse de cisaillement = $100 m.s^{-1}$, $\rho_l = 696 kg.m^{-3}$, $\rho_g = 25 kg.m^{-3}$, $\mu_l = 1.2 \cdot 10^{-3} kg.m^{-1}.s^{-1}$, $\mu_g = 1.0 \cdot 10^{-5} kg.m^{-1}.s^{-1}$, $\sigma = 0.06 N.m^{-1}$, turbulence = 5%. Calculs réalisés par l'équipe de A. Berlemont, Coria [97].

former et l'écoulement n'est plus uniquement longitudinal. Les structures interfaciales en jeu restent assez grosses. Plus en aval, les ligaments se sont étirés jusqu'à former des filaments et mêmes des gouttes. Les structures interfaciales sont ici bien plus petites. Sur la figure 9(b), un zoom est effectué plus en aval. Il y a coexistence de grosses structures (proches de l'axe) et de petites structures (gouttes à la périphérie). Ainsi, le processus d'atomisation regroupe toute une gamme d'échelles interfaciales allant de la monocomposante connexe par arc (le jet en lui-même) jusqu'aux toutes petites gouttes. Le maillage utilisé doit donc rendre compte de toutes ces échelles en évitant la sous-résolution des gouttes. La figure 10 représente le processus d'atomisation vue cette fois-ci sur le plan expérimental. Sur cette figure, on voit bien l'aspect multi-échelles du processus d'atomisation où grandes et petites échelles interfaciales se cotoient.

L'outil numérique et le processus de désintégration

Dans le contexte de l'atomisation d'un jet liquide par un écoulement gazeux cisailant, les deux phases sont immiscibles. Deux approches permettent l'étude des écoulements à phases

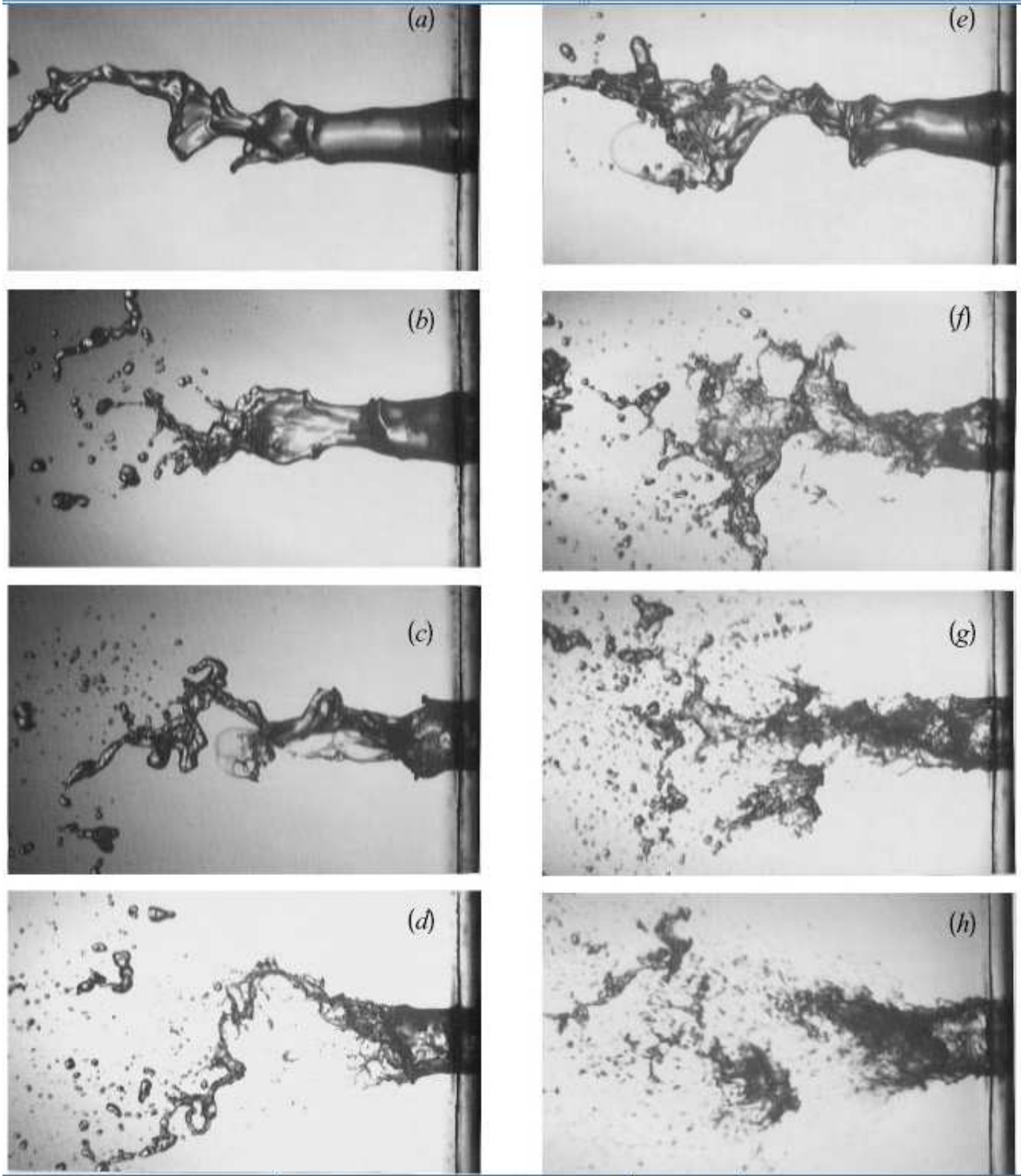


FIGURE 10 – Atomisation d’un jet liquide par un écoulement d’air annulaire. (a) : $U_g = 15.75 \text{ m.s}^{-1}$, $M = 3.8$, $We = 16$, $Re_l = 830$; (b) : $U_g = 21.7 \text{ m.s}^{-1}$, $M = 7.35$, $We = 31$, $Re_l = 1120$; (c) : $U_g = 28 \text{ m.s}^{-1}$, $M = 12.2$, $We = 52$, $Re_l = 1450$; (d) : $U_g = 40.6 \text{ m.s}^{-1}$, $M = 25$, $We = 110$, $Re_l = 2100$; (e) : $U_g = 21.7 \text{ m.s}^{-1}$, $M = 2.05$, $We = 31$, $Re_l = 1120$; (f) : $U_g = 40.6 \text{ m.s}^{-1}$, $M = 7$, $We = 110$, $Re_l = 2100$; (g) : $U_g = 56 \text{ m.s}^{-1}$, $M = 13$, $We = 210$, $Re_l = 2900$; (h) : $U_g = 85.4 \text{ m.s}^{-1}$, $M = 31$, $We = 489$, $Re_l = 4420$. D’après Lasheras [72]

immiscibles :

- Une des deux phases est dispersée dans l'autre. Une phase est dite continue (c'est la phase porteuse) et l'autre est dispersée. C'est le cas des aérosols par exemple. Dans l'approche euler/lagrange, chaque particule est suivie individuellement de façon lagrangienne. La phase fluide est résolue par les équations de Navier-Stokes. Dans l'approche euler/euler, les particules sont vues comme une phase continue et on dispose d'équations de transport de type milieu continu pour la phase dispersée.
- Les deux phases sont séparées par une interface. Les équations de Navier-Stokes sont résolues dans chacune des phases. Le saut du tenseur des contraintes à l'interface constitue la condition limite entre les deux phases.

Notre thème d'étude étant l'atomisation primaire, aucune des deux phases n'est dispersée dans l'autre (ce qui n'est plus le cas plus en aval lors de la formation du spray). Ainsi, les deux phases seront considérées comme deux phases séparées par une interface.

Les différentes approches numériques pour le traitement de la turbulence

L'examen de la figure 10 met en évidence la coexistence de structures de tailles très différentes dans le phénomène d'atomisation. La méthode numérique employée pour résoudre l'atomisation doit donc être capable de rendre compte de toutes ces échelles géométriques. La turbulence générée par le cisaillement de la nappe par le gaz à grande vitesse gagne rapidement tout l'écoulement. Différentes échelles turbulentes se mettent en place et la méthode numérique utilisée pour le calcul de l'atomisation doit prendre en compte toutes échelles, notamment les plus petites. Deux types d'échelles interviennent donc dans la résolution numérique de l'atomisation : les échelles turbulentes et celles liées à l'interface.

Trois approches principales existent pour la simulation des écoulements turbulents. L'approche

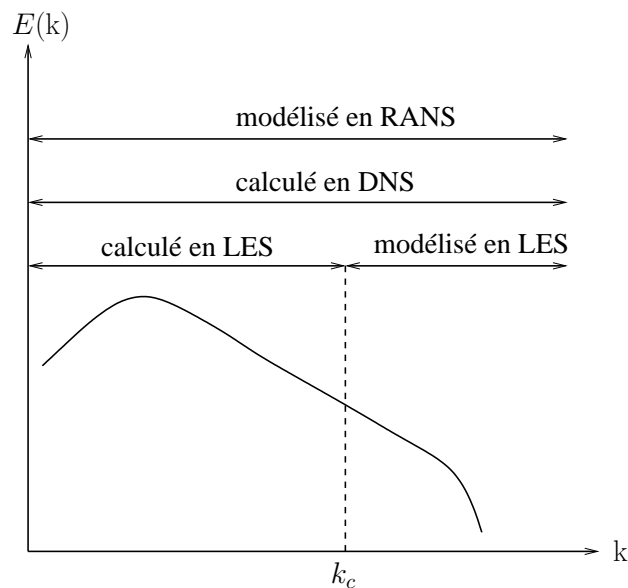


FIGURE 11 – Comparaison entre DNS, LES et RANS. k_c est le nombre d'onde de coupure de la LES.

RANS décrit le comportement moyen de l'écoulement et nécessite la modélisation des effets instationnaires. La LES ne résout que les grandes échelles de la turbulence. Les échelles plus petites sont modélisées via un modèle de sous-maille. La DNS résout toutes les échelles de la turbulence. Aucun modèle n'est nécessaire.

Direct Numerical Simulation (D.N.S.)

La simulation numérique directe ou D.N.S. (Direct Numerical Simulation) résout chacune de ces échelles tant sur le plan spatial que temporel. On comprend alors tout de suite que la D.N.S. devient vite très coûteuse surtout lorsque le nombre de Reynolds devient grand. Dans un écoulement turbulent, le rapport entre l'échelle caractéristique des plus grandes structures de l'écoulement (appelée échelle intégrale Λ) et la plus petite échelle (correspondant à l'échelle dissipative appelée échelle de Kolmogorov η_k) est donné par :

$$\frac{\Lambda}{\eta_k} = \mathcal{O}\left(Re_t^{3/4}\right) \quad (1)$$

où Re_t est le nombre de Reynolds turbulent. La turbulence étant par essence un phénomène tridimensionnel, le nombre de degrés de liberté nécessaires pour la représentation de toutes les échelles d'un écoulement turbulent est donc proportionnel à $\left(Re_t^{3/4}\right)^3 = Re_t^{9/4}$. La D.N.S. résout chacun de ces degrés de liberté. Le rapport des temps caractéristiques évoluant comme $\mathcal{O}\left(Re_t^{3/4}\right)$, la résolution des équations de Navier-Stokes pendant une durée égale au temps caractéristique de l'échelle la plus énergétique nécessite $\mathcal{O}(Re_t^3)$ degrés de liberté. Pour un nombre de Reynolds de 10^8 caractéristique des configurations de l'aéronautique, ceci correspond à environ 10^{24} degrés de liberté, ce qui n'est pas accessible à la puissance de calcul actuelle¹. Dans son article [101], Moin explique comment la D.N.S. est un outil de recherche et non pas une méthode dite de "brute-force" pour la résolution de problèmes typiques industriels. La D.N.S. a permis la compréhension de phénomènes physiques pour des écoulements qui sont difficilement réalisables en laboratoire. La D.N.S. contribue aussi au développement de modèles pour la turbulence par analyse *a priori*. Dans le cas de l'atomisation, la taille des gouttelettes qui peuvent devenir très petites (phénomène de brouillard) est une contrainte de résolution supplémentaire pour la D.N.S. Actuellement, la D.N.S. est limitée à des Reynolds modérés et pour réduire le nombre de degrés de liberté et donc se rapprocher de configurations plus réalistes, des modèles ont été proposés.

Les D.N.S. du processus d'atomisation primaire en sont encore à leurs débuts à cause des coûts élevés et des difficultés numériques. La plupart des études réalisées à ce sujet ne sont pas des D.N.S. au sens strict du terme. En effet, la résolution spatiale est bien souvent insuffisante, et l'on a plutôt affaire à des D.N.S. sous-résolues ou bien à des L.E.S. sans modèle (explicite). Ainsi toutes les contributions sous-maille qui naissent de la présence de l'interface et des sauts du tenseur des contraintes à l'interface ne sont pas prises en compte. Une possible amélioration est l'utilisation de maillages adaptatifs raffinés au voisinage de l'interface [48, 51]. De Villier *et al.* [28] utilisent une approche quasi-DNS pour simuler la désintégration d'un jet Diesel. La distribution de gouttes obtenue varie en fonction de la résolution spatiale, ce qui montre la limite de l'approche quasi-DNS pour cette configuration. Bianchi *et al.* [13, 12]

1. En 2009, la puissance informatique ne permet pas une simulation directe à des nombres de Reynolds caractéristiques de l'aéronautique.

simule l'atomisation dans les moteurs Diesel avec une résolution supérieure. L'influence de la turbulence dans l'injection est étudiée, et il est démontré que la turbulence a un impact fort sur la longueur du cœur du jet et sur la masse atomisée. En revanche, l'impact est faible sur la distribution de taille des gouttes. Les deux études précédentes ont recours à la méthode VOF pour capturer l'interface. Menard [96] utilise une méthode couplée VOF/level-set avec une approche ghost-fluid pour étudier l'atomisation d'un moteur Diesel. Des fluctuations turbulentes sont imposées à la sortie de l'injecteur. Aucun modèle L.E.S. n'est appliqué et les simulations sont supposées être des D.N.S. Bien que leur grille soit deux fois plus fine que celle de Bianchi [12], le rapport $\Delta x/\eta_k$ vaut trois environ (où η_k est l'échelle de Kolmogorov). Desjardins [32, 33] réalise l'atomisation d'un jet Diesel via une approche level-set / ghost-fluid. Des gouttes et des structures de tailles différentes sont obtenues. Malheureusement, aucune convergence en maillage n'est effectuée. Pour ce qui est de la configuration coaxiale, Kim [61] a utilisée un maillage raffiné le long de la level-set pour réaliser des DNS d'un jet liquide à faible rapport de densité. Il retrouve le processus de désintégration mis en évidence expérimentalement par Marmottant [94]. Les petites gouttes à proximité de l'interface sont retirées de la méthode de capture d'interface et sont ajoutées dans un modèle de spray lagrangien.

La réduction du nombre de degrés de liberté signifie que certaines échelles seront résolues mais pas d'autres. La non linéarité des équations de Navier-Stokes implique le couplage des échelles. Ainsi les échelles ne peuvent pas être résolues indépendamment les unes des autres. Afin de réduire le nombre de degrés de liberté, plusieurs techniques sont utilisées [122].

Reynolds Averaged Navier-Stokes equations (R.A.N.S.)

La moyenne statistique de la solution des équations de Navier-Stokes est directement calculée, et la fluctuation n'est pas résolue directement mais prise en compte via un modèle de turbulence. Les méthodes R.A.N.S. supposent une séparation des échelles. Ce sont les méthodes les plus utilisées dans le milieu industriel et elles ne sont pas adaptées pour des configurations académiques car le caractère statistique de la solution interdit toute description fine de la physique. Ceci est d'autant plus vrai lorsque la moyenne statistique est associée à la moyenne temporelle. Seules les grandeurs stationnaires sont accessibles par cette méthode. Le processus de désintégration d'un jet liquide est intrinsèquement instationnaire via le mouvement d'oscillation global de la nappe par exemple. L'aspect instationnaire peut être pris en compte par l'approche U.R.A.N.S.

Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes equations (U.R.A.N.S.)

Ici, le champ moyen et certains modes basse-fréquence en temps sont directement calculés. Ces méthodes [122] se retrouvent sous le nom de méthode U.R.A.N.S., ou Semi-Deterministic Simulation S.D.S., ou encore Very Large Eddy Simulation V.L.E.S., et parfois aussi techniques de capture des structures cohérentes (Coherent Structure Capturing, C.S.C.). Ici, le champ de vitesse est décomposé comme la somme de trois termes : la moyenne temporelle de la solution exacte, la moyenne statistique conditionnelle de la moyenne temporelle qui représente la contribution des modes cohérents de l'écoulement, et la fluctuation turbulente qui représente la partie aléatoire de la turbulence. Cette approche est instationnaire et contient donc plus d'information que l'approche purement R.A.N.S., mais n'autorise pas

la description déterministe d'un événement particulier. La description du processus d'atomisation est déterministe car les échelles interfaciales sont du même ordre que celles de la turbulence. En effet, le spectre des échelles interfaciales est plein. Les méthodes U.R.A.N.S. ne sont donc pas adaptées pour la simulation du processus d'atomisation. Une application où cette méthode est très efficace est celle des systèmes où le caractère instationnaire est forcé par une action extérieure [122].

On va détailler maintenant deux techniques qui utilisent l'approche R.A.N.S. pour traiter des écoulements diphasiques.

L'approche eulérienne R.A.N.S. à phases mélangées a été proposée par Vallet [156] pour la simulation numérique de l'atomisation primaire d'un spray Diesel. C'est une approche homogène à deux fluides où les deux phases ne sont pas séparées. Dans chaque cellule de calcul, chaque phase peut exister simultanément avec l'autre et chacune des phases peut se déplacer à travers l'autre indépendamment l'une de l'autre. Chaque phase est affectée d'une masse volumique ρ^* définie par :

$$\begin{cases} \rho_l^* = \alpha \rho_l \\ \rho_g^* = (1 - \alpha) \rho_g \end{cases}$$

où α est la fraction volumique liquide. Alors on a $\rho = \alpha \rho_l + (1 - \alpha) \rho_g$. La fraction massique liquide Y_l est définie ainsi :

$$\frac{1}{\rho} = \frac{Y_l}{\rho_l} + \frac{1 - Y_l}{\rho_g}$$

Si \overline{Y}_l est la fraction massique moyennée en temps, la fraction massique liquide de Favre est définie par :

$$\tilde{Y}_l = \frac{\overline{\rho Y_l}}{\overline{\rho}}$$

La méthode consiste à résoudre une équation de transport pour $\overline{\rho \tilde{Y}_l}$ qui fournit la dispersion turbulente du jet liquide. La méthodologie R.A.N.S. impose de travailler à hauts nombres de Reynolds et de Weber, si bien que la dispersion turbulente de ce jet est indépendante de ces deux nombres. A cette équation de transport s'ajoute celle pour une nouvelle variable $\overline{\Sigma}$, une valeur moyenne de l'aire interfaciale par unité de volume. Cette équation de transport pour $\overline{\Sigma}$ se compose de termes convectifs, diffusifs, productifs (étirement de la surface) et de destruction (coalescence). Une fois connus $\overline{\rho \tilde{Y}_l}$ et $\overline{\Sigma}$, on peut remonter au rayon moyen de goutte circulaire $r = 3\overline{\rho \tilde{Y}_l} / \rho_l \overline{\Sigma}$ utile pour une advection lagrangienne. Cette approche eulérienne à phase mélangée de l'atomisation primaire souffre des inconvénients des méthodes R.A.N.S. En effet, la forme de l'équation pour le transport de $\overline{\Sigma}$ est supposée universelle sans tenir compte de la géométrie de l'écoulement ni des conditions limites. Par exemple, l'amas de gouttes liquides n'est pas pris en compte avec cette méthode.

Dans sa thèse, Yu [176] utilise une méthode level-set pour capturer l'interface eau/air couplée à une résolution R.A.N.S. des équations, dans le cadre de l'étude du déferlement des vagues sur la coque des bateaux ou les plateformes offshore (*green water effect*). Les équations d'advection de la level-set ϕ , de conservation de la masse et de quantité de mouvement sont

données par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \phi = 0 \\ \sum_{i=1}^3 \frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \\ \frac{\partial U_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 \left(U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{\rho(\phi)} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\nu(\phi)}{Re} \nabla^2 U_i + \frac{\delta_{i,3}}{Fr^2} = 0 \end{array} \right.$$

Où le tenseur des contraintes de Reynolds est exprimé en fonction de la viscosité turbulente ν_t :

$$-\overline{u_i u_j} = \nu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} k$$

k étant l'énergie cinétique turbulente. Les propriétés physiques du fluide ρ et ν sont exprimées en fonction de la level-set :

$$\begin{cases} \rho(\phi) = \rho_a + (\rho_e - \rho_a) H(\phi) \\ \nu(\phi) = \nu_a + (\nu_e - \nu_a) H(\phi) \end{cases}$$

où $H(\phi)$ est la fonction Heaviside, ρ_a la masse volumique de l'air, ρ_e celle de l'eau, ν_a la viscosité de l'air et ν_e celle de l'eau. Les simulations numériques sont en bon accord avec les mesures PIV sur une configuration 2D.

Les approches précédentes montrent que les méthodes R.A.N.S. peuvent être utilisées pour la simulation de configurations instationnaires. Mais les limites de ces approches sont rapidement atteintes. En effet, les approches R.A.N.S. considèrent que la turbulence est aléatoire et qu'elle se rajoute à l'écoulement stationnaire. En réalité, la turbulence peut être caractérisée par des échelles de tailles différentes et n'est pas assimilable à un simple bruit blanc. De plus, les approches R.A.N.S. supposent que la turbulence est à l'équilibre, ce qui n'autorise qu'une seule échelle de temps turbulente. Ainsi, les caractéristiques multi-échelles de l'atomisation font que les techniques R.A.N.S. sont mal adaptées au calcul de désintégration. En effet, il n'est pas possible d'opérer une nette séparation des échelles pour une approche statistique de la turbulence. Il est très difficile de dégager un écoulement statistiquement stationnaire dans le processus d'atomisation. La L.E.S. permet d'intégrer cet aspect multi-échelles en ne résolvant que les plus grandes échelles.

La simulation aux grandes échelles ou Large Eddy Simulation (L.E.S.)

En L.E.S., seuls les modes basse-fréquence, c'est-à-dire les plus grandes échelles, sont directement résolus. L'action des petites échelles sur les grandes est modélisée par l'ajout d'un modèle de sous-maille dans les équations de Navier-Stokes. Les grandes échelles sont séparées des petites par l'action d'un filtre passe-bas des équations de Navier-Stokes. C'est la longueur de coupure du filtre qui détermine la séparation entre grandes et petites échelles. Pour le modèle de sous-maille, il existe deux grandes familles de modélisation. La première est la modélisation *fonctionnelle* où l'action des petites échelles est prise en compte via l'hypothèse de viscosité turbulente. La modélisation *structurelle* quant à elle ne fait pas d'hypothèse sur

le comportement physique des petites échelles. Le modèle de sous-maille est construit par analyse mathématique sans préjuger du comportement dissipatif des petites échelles (pas de viscosité turbulente). Enfin les méthodes *mixtes* mêlent les deux approches *structurelles* et *fonctionnelles*. De nos jours, la L.E.S. est largement développée dans le monde industriel, mais limitée au cas monophasique. Les modèles de sous-maille spécifiques au diphasique ne sont pas encore assez performants (voire inexistants) [81, 149, 66, 163] pour une utilisation systématique dans l'industrie. La difficulté provient du couplage entre les différentes phases. Ce couplage peut se manifester au travers d'une interface pour des écoulements immiscibles à phases séparées ou lors de l'interaction d'une phase dispersée avec la phase continue. Ce couplage modifie le spectre de la turbulence et l'interaction d'une interface avec la turbulence réorganise l'énergie entre les différentes échelles [62]. Le modèle de sous-maille doit être capable de prendre en compte ces transferts énergétiques. Ainsi, avant de développer des modèles L.E.S. cohérents, il faut comprendre la physique de cette interaction entre la turbulence et l'interface. Une analyse *a priori* de simulations directes permettra de mettre au point des modèles de sous-maille qui prennent en compte les couplages propres à la nature diphasique d'un écoulement.

Les efforts de modélisation L.E.S. du processus d'atomisation concernent essentiellement l'atomisation secondaire. En effet, les simulations de l'atomisation primaire avec l'apparition des ligaments sont encore limitées aux faibles nombres de Reynolds et sont essentiellement 2D [152, 177]. Dans la simulation de l'atomisation, la L.E.S. rencontre deux configurations limites lorsque l'approche retenue considère deux phases séparées par une interface :

- l'interface est correctement résolue et les plus petites échelles interfaciales sont plus grosses que la maille de calcul. Dans cette configuration, la formulation L.E.S. doit être cohérente avec la méthode de capture d'interface D.N.S. (level-set, VOF, front-tracking, ...). Ces configurations sont rencontrées à la sortie de l'injecteur, bien avant la formation du brouillard : c'est le régime de l'atomisation primaire.
- l'interface offre des déformations plus petites que la maille. Alors la formulation L.E.S. diphasique doit coïncider avec celle utilisée pour les sprays où la taille des gouttelettes est bien inférieure à la taille de la maille de calcul. C'est le régime de l'atomisation secondaire.

Dans [23], l'idée de Chesnel *et al.* est d'utiliser une méthode de capture d'interface quand cette dernière est bien résolue (atomisation primaire), et, plus en aval, quand des gouttelettes de diamètre inférieur à la maille apparaissent, le modèle passe à une vision continue. En effet, la méthode VOF utilisée pour l'interface à grande échelle n'est pas assez précise pour décrire le spray sous-maille. Le modèle utilise alors une nouvelle variable, la densité interfaciale, qui est définie comme la quantité d'interface dans une cellule de calcul. L'idée est alors de résoudre une équation de transport pour la densité interfaciale [156]. Alors que la vision est discontinue lorsque les échelles interfaciales sont correctement résolues, la vision est continue lorsque le spray est caractérisé par des échelles inférieures à la longueur de coupure du filtre. Ham *et al.* [45] proposent une approche qui permet de traiter à la fois le cas de l'atomisation primaire et de l'atomisation secondaire. Il s'agit d'une technique hybride eulérienne/lagrangienne pour la phase liquide. L'atomisation primaire est calculée grâce à la méthode particules/level-set de Enright [35]. Cette méthode capture les grandes échelles de l'atomisation primaire. L'apparition des ligaments ainsi que les grandes déformations de la nappe liquide sont pris en compte par la méthode level-set. Les grandes déformations de la nappe peuvent engendrer des zones de fortes courbures avec la naissance de petites structures sous-résolues.

Ces petites échelles ne sont plus alors prises en compte par la level-set, mais par une représentation lagrangienne du spray. Une approche stochastique des gouttelettes est utilisée pour la modélisation de l'atomisation secondaire. Le rayon caractéristique des gouttes devient une variable stochastique qui obéit à une fonction de distribution de taille initiale.

D'une façon générale, le mécanisme d'atomisation secondaire est mieux compris que l'atomisation primaire. En effet, le grand nombre de gouttelettes caractéristiques d'un spray permet de considérer la phase liquide comme dispersée dans la phase gazeuse. Les approches à deux fluides euler/lagrange ou même euler/euler sont possibles pour résoudre l'atomisation secondaire. Mais l'atomisation primaire doit être résolue avec précision pour nourrir les modèles stochastiques qui permettent la résolution du spray. A la sortie de l'injecteur, les deux phases sont séparées par une interface. Les modèles LES qui résolvent alors l'atomisation primaire doivent prendre en compte cette interface matérielle et son couplage avec les deux phases et notamment la turbulence. Même si à ce niveau, une LES doit avoir une précision quasi-DNS (surtout proche de l'interface), les modèles de sous-maille existant prennent mal (ou pas du tout) en compte les interactions entre l'interface et la turbulence. Même si l'on a vu que l'utilisation de la DNS était prohibitif, son recours est nécessaire pour comprendre les mécanismes d'interaction entre interface et turbulence, et ainsi dériver les modèles de sous-maille adéquat par une analyse *a priori*. Ainsi, la modélisation LES de l'atomisation primaire passe par une étude approfondie des DNS de l'interaction interface/turbulence. Une fois ces modèles trouvés, les modèles LES propres à l'atomisation secondaire pourront être nourris avec précision.

Sur la figure 12, un écoulement rencontre une marche descendante. Les approches D.N.S., L.E.S. et R.A.N.S. sont comparées. La configuration est instationnaire et turbulente. La D.N.S. capte toutes les échelles (ici les plus petits tourbillons). La L.E.S. ne calcule que les plus grandes échelles. Ceci apparaît sur la figure 12(b) où seuls les plus gros tourbillons sont représentés. La méthode R.A.N.S., quant à elle, est incapable de rendre compte de la nature instationnaire de l'écoulement. Seules les grosses structures stationnaires sont calculées.

Objectifs de la thèse

La désintégration d'un jet liquide peut se décomposer en deux processus successifs : l'atomisation primaire et secondaire. Les méthodes numériques ainsi que les modèles utilisés pour traiter chacun de ces processus sont différents. Notre sujet d'étude est l'atomisation primaire, et les composants eau/air sont à phases séparées par une interface matérielle. L'aspect multi-échelles ainsi que la forte instationnarité du phénomène physique limitent l'utilisation de méthodes R.A.N.S. pour résoudre l'écoulement. L'approche L.E.S. est prometteuse, mais les modèles de sous-maille diphasiques sont très incomplets voire inexistantes. Notamment, les modèles L.E.S. existants ne prennent pas en compte le couplage interface/turbulence au voisinage de l'interface. Négliger ce couplage dans le modèle L.E.S. dégrade d'autant plus la solution que la discontinuité entre les deux fluides est raide (fort saut de masse volumique, fortes tensions de surface, fortes courbures locales). Evidemment, le processus d'atomisation primaire regroupe tous ces paramètres contraignants et défavorables pour un calcul L.E.S. diphasique. Des travaux ont été menés sur l'interaction interface/turbulence, que ce soit en D.N.S. ou en L.E.S., mais ils se limitent à chaque fois aux deux configurations suivantes :

- Soit le régime de l'écoulement est pleinement turbulent, mais l'interface se déforme peu



(a) : D.N.S.



(b) : L.E.S.



(c) : R.A.N.S.

FIGURE 12 – Simulation numérique d'une marche descendante. Les trois méthodes (D.N.S., L.E.S. et R.A.N.S. sont comparées). Images : CTR, Stanford.

- Soit l'interface admet de larges déformations, mais la turbulence n'est pas pleinement développée

Le phénomène d'atomisation met en jeu de grandes déformations de l'interface (formation de ligaments) dans un écoulement où les deux phases liquide et gazeuse sont pleinement turbulentes. L'objectif de cette thèse est la compréhension fine des interactions entre l'interface et la turbulence, dans le cas où l'interface est fortement perturbée (avec de grandes courbures). Une fois les mécanismes d'interaction compris, des modèles L.E.S. diphasiques pourront être dérivés. L'analyse poussée de l'interaction interface/turbulence nécessite le recours à la D.N.S. Les simulations réalisées relèvent de calculs intensifs hautement résolus pour capturer les plus petites échelles turbulentes et interfaciales. Ceci nous permettra de réaliser une base de données D.N.S. sur l'interaction interface/turbulence. Cette base de données servira de point de départ pour une analyse *a priori* qui permettra à terme de dériver les termes sous-maille spécifiques au couplage diphasique. Le travail se décompose ainsi :

- Dans une première partie, les outils numériques utilisés pour réaliser les D.N.S. sont présentés et validés sur les cas de test de base de la littérature. Tout d'abord, le modèle physique retenu et les équations de Navier-Stokes instationnaires, incompressibles sont présentées, ainsi que l'équation d'advection de l'interface. Les différentes méthodes de capture d'interface sont présentées et testées. Un chapitre est consacré à l'équation d'advection de l'interface par la méthode level-set. Différents schémas numériques utilisés pour la discrétisation du terme spatial de cette équation sont présentés. Une méthode hybride de level-set/particules est testée également. Finalement, toutes ces méthodes de capture d'interface sont couplées au solveur des équations de Navier-Stokes. Les différentes méthodes qui en résultent sont comparées sur différents cas tests de base.
- Dans une deuxième partie, les simulations D.N.S. de l'interaction interface/turbulence sont réalisées. Après quelques rappels généraux sur la turbulence, un calcul D.N.S. sur une THI monophasique est menée pour valider les différents outils numériques et calibrer la THI monophasique avant de réaliser des calculs diphasiques. Enfin, une nappe est ajoutée dans la THI et l'étude de l'interaction interface/turbulence est menée dans ce chapitre.
- Enfin, dans une troisième partie, l'analyse *a priori* des DNS diphasiques de la partie précédente est réalisée. Tout d'abord, le filtrage des équations conditionné par la phase est présenté. Ensuite, le filtrage à proprement parler est réalisé en post-traitement sur les résultats DNS, et l'étude des différents termes sous-maille qui en résultent est menée. Puis, un rappel sur les différents modèles LES existants est effectué avant d'appliquer un de ces modèles à notre configuration.

Première partie

Présentation et validation des modèles et des méthodes numériques

Le but de cette partie est la présentation et la validation des différents outils disponibles pour traiter d'écoulements isothermes incompressibles diphasiques turbulents à interface séparée. Les équations de Navier-Stokes diphasiques vont également être présentées, et la problématique liée au saut du tenseur des contraintes à l'interface va être abordée. La modélisation et la représentation numérique de ce saut constituent une des difficultés majeures du traitement des écoulements diphasiques. Les différentes techniques numériques pour résoudre les écoulements diphasiques incompressibles à interface seront éprouvées sur les cas tests classiques de la littérature. Le but de cette partie est de dégager les méthodes numériques les plus efficaces pour traiter de l'atomisation, à savoir une interface grandement déformée, avec de fortes courbures et des sous-résolutions locales. Tout ceci en écoulement 3D, instationnaire et turbulent.



Chapitre 1

Modèle physique et présentation des équations

Sommaire

1.1	Equations de conservation de la masse et de quantité de mouvement	26
1.2	L'hypothèse d'incompressibilité	27
1.3	Hypothèse de fluide newtonien	28
1.4	Le découplage vitesse/pression	28
1.4.1	Méthode de projection	28
1.4.2	Méthode du lagrangien augmenté	29
1.5	Les équations pour les écoulements multiphasiques	30
1.5.1	La tension superficielle	30
1.5.2	Conditions de saut à travers une interface : cas général	31

L'eau, l'air, l'huile sont regroupés sous le terme générique de fluide. Ce sont des milieux matériels parfaitement déformables. Les déformations peuvent être importantes sans perte de cohésion du fluide. Si on observe un fluide à très petite échelle, on remarque que ce dernier est constitué de molécules qui ne sont pas liées entre elles par des liaisons covalentes (des liaisons chimiques). Les molécules interagissent entre elles via les forces de Van der Waals. Lors de l'étude des fluides, la question de l'échelle à laquelle cette étude doit être menée se pose. A l'échelle moléculaire, chaque molécule est indépendante : c'est l'échelle du physicien et chaque molécule doit être considérée comme un système à part entière. Si on augmente l'échelle et que l'on regarde le fluide de plus loin, la dynamique du fluide peut être prédite sans connaître précisément la dynamique de chacune des molécules qui le constituent. L'ensemble des propriétés de l'écoulement est moyenné sur un grand nombre de molécules. C'est l'échelle du mécanicien qui considère le fluide à l'échelle macroscopique comme un milieu continu. Pour décrire un fluide, on introduit la notion de 'particule fluide'. On isole par la pensée des parties restreintes du fluide (les 'particules fluide') qui contiennent statistiquement le même nombre de molécules et qui doivent avoir un volume $V = a^3$ dont la dimension a vérifie les hypothèses de milieu continu :

- a est très petit devant les dimensions caractéristiques de l'écoulement
- a doit être grand devant le libre parcours moyen des molécules

Par exemple, prenons le cas de l'air à $300K$ et à pression atmosphérique, contenu dans une boîte de $1m^3$. La boîte contient alors 40 moles d'air, soit environ $2.4 \cdot 10^{25}$ molécules. Ceci revient à $3 \cdot 10^8$ molécules par dimension d'espace. La distance moyenne entre deux molécules peut alors être estimée à 3.5 nm . Dans cette configuration, le libre parcours moyen vaut 68 nm [4]. Dans le cas de l'air à pression ambiante, la distance moyenne entre deux molécules est inférieure au libre parcours moyen d'un ordre de grandeur, et l'hypothèse de milieu continu est valide. Nous supposerons dans ce manuscrit que l'hypothèse de milieu continu est toujours valide.

Le modèle de particule fluide permet d'utiliser la description eulérienne des champs des différentes fonctions de l'écoulement. Les champs s'expriment comme une fonction des variables d'espace et de temps. Ces fonctions correspondent à la moyenne des fonctions prises par chacune des molécules contenues dans le volume délimitant la particule fluide.

1.1 Equations de conservation de la masse et de quantité de mouvement

Soit $V(t)$ un volume contenant un ensemble de particules fluides. $V(t)$ a pour surface $S(t)$. Soit $f(t)$ une grandeur volumique définie dans $V(t)$ dont l'intégrale en volume est donnée par :

$$F(t) = \iiint_{V(t)} f(x, y, z, t) dV \quad (1.1)$$

Alors, la dérivée temporelle (dérivée particulaire) de $F(t)$ est donnée par :

$$\frac{dF(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \iiint_{V(t)} f dV = \iiint_{V(t)} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f\mathbf{u}) \right) dV \quad (1.2)$$

où \mathbf{u} est la vitesse. On suit maintenant le volume $V(t)$ au cours du temps. Sa position, sa forme et ses dimensions vont changer au cours du temps, mais le volume reste constitué des mêmes particules fluides et ainsi la masse totale est conservée. Ceci se traduit par :

$$\frac{d}{dt} \iiint_{V(t)} \rho dV = 0 \quad (1.3)$$

En utilisant la relation précédente, cette équation se réécrit :

$$\iiint_{V(t)} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) \right) dV = 0 \quad (1.4)$$

Le volume V étant arbitraire, on obtient la formulation locale de l'équation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0 \quad (1.5)$$

Intéressons nous maintenant à la quantité de mouvement. D'après le principe fondamental de la dynamique, la variation temporelle de la quantité de mouvement est égale à l'ensemble des forces extérieures qui agissent sur l'élément de volume. Ici, les forces extérieures sont de deux types : les forces volumiques, qui s'appliquent à distance (par exemple la gravité), et

qui seront désignées par le terme générique \mathbf{f} ici. Et les forces de surface qui sont des forces de contact, désignées ici par \mathbf{T} . Le principe fondamental de la dynamique s'écrit alors :

$$\frac{d}{dt} \iiint_{V(t)} \rho \mathbf{u} d\mathcal{V} = \iiint_{V(t)} \rho \mathbf{f} d\mathcal{V} + \iint_V \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} dS \quad (1.6)$$

En utilisant l'équation (1.2) et le théorème de la divergence, et en prenant un volume $V(t)$ arbitraire, l'équation de la quantité de mouvement se réécrit en formulation locale :

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \rho \mathbf{f} + \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (1.7)$$

Les équations (1.5) et (1.7) constituent les équations de Navier-Stokes sous leur forme conservative.

1.2 L'hypothèse d'incompressibilité

D'après la relation (1.5), il est évident que :

$$\rho = cste \Rightarrow \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

Intéressons nous maintenant à la réciproque, à savoir si l'équation $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ est résolue, obtient-on un fluide où la masse volumique ρ est constante? Dans le cas stationnaire, l'équation (1.5) se résume à :

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0$$

Si la divergence est nulle, et en supposant que la vitesse est non nulle, on obtient que $\mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0$. Deux interprétations sont possibles :

- ρ est constante dans le fluide et ainsi $\nabla \rho = 0$
- $\mathbf{u} \perp \nabla \rho$. Ce cas correspond à un écoulement stratifié en densité où la masse volumique peut varier d'une ligne de courant à l'autre.

Dans ce manuscrit, l'hypothèse d'incompressibilité (masse volumique constante) sera assurée par la condition de champ de vitesse à divergence nulle.

$$\rho = cste \Leftrightarrow \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

D'après la relation suivante :

$$\nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}$$

et en utilisant l'hypothèse d'incompressibilité, l'équation (1.7) se réécrit sous la forme non conservative suivante :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \rho \mathbf{f} + \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (1.8)$$

1.3 Hypothèse de fluide newtonien

Dans l'équation (1.8), le tenseur des contraintes \mathbf{T} exprime les forces de surface et de volume qui s'exercent sur l'élément fluide. \mathbf{T} se décompose en une contrainte isotrope due à la pression du fluide et à une contrainte anisotrope due aux effets visqueux. Le tenseur \mathbf{T} peut alors se réécrire :

$$\mathbf{T}_{ij} = -p \delta_{ij} + \mathbf{D}_{ij}$$

où p est la pression, δ le tenseur de Kronecker et \mathbf{D} le tenseur des contraintes visqueuses. Les fluides que nous utilisons dans notre travail sont dits newtoniens, c'est-à-dire que le tenseur des contraintes visqueuses \mathbf{D} est une fonction linéaire du tenseur des déformations \mathcal{E} défini par :

$$\mathcal{E}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

Alors le tenseur des contraintes visqueuses se réduit à :

$$\mathbf{D}_{ij} = 2\mu \mathcal{E}_{ij}$$

où μ est la viscosité dynamique. Alors, l'équation (1.8) se réécrit :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \rho \mathbf{f} - \nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + {}^T \nabla \mathbf{u})] \quad (1.9)$$

1.4 Le découplage vitesse/pression

Les équations de Navier-Stokes incompressibles dont nous recherchons une solution dans chaque phase sont les suivantes :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \rho \mathbf{f} + \nabla \cdot \mathbf{T} \end{cases} \quad (1.10)$$

avec les sauts à l'interface. Une difficulté majeure dans la recherche d'une solution du système 1.10 est le couplage entre la vitesse et la pression au travers de la contrainte d'incompressibilité. Pour mener à bien le découplage pression/vitesse, nous allons présenter deux techniques : la méthode de projection et la méthode du lagrangien augmenté.

1.4.1 Méthode de projection

Une succession d'équations sont résolues, chacune d'entre elles étant découplée vis-à-vis du couple vitesse/pression. Le principe repose sur le théorème de décomposition de Hodge qui affirme que tout champ \mathbf{A} peut être décomposé en la somme d'un champ à divergence nulle \mathbf{A}^d et d'un champ dérivant du gradient d'une fonction scalaire f :

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^d + \nabla f$$

En appliquant l'opérateur de projection sur l'espace des champs à divergence nulle au champ de vitesse, on garantit la condition d'incompressibilité pour ce dernier.

La méthode de projection utilisée est celle de Chorin [24] et Temam [147]. C'est la version originale de l'algorithme de projection dans une formulation totalement explicite. La méthode se décompose en la résolution de trois équations successives. Dans un premier temps (étape de prédiction), un champ de vitesse intermédiaire \mathbf{u}^* est déterminé. A partir de ce champ intermédiaire, la solution en pression est calculée par résolution d'une équation de Poisson. Finalement (étape de correction), \mathbf{u}^* est estimée selon une décomposition de Hodge pour obtenir un champ de vitesse à divergence nulle.

– Etape de prédiction :

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n + \Delta t \left(-(\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\mu \mathcal{E}^n) \right)$$

– Solution en pression :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\Delta t}{\rho} \nabla p^{n+1} \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^*$$

– Etape de correction

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla p^{n+1}$$

On obtient un système d'équations elliptiques. Dans l'étape de prédiction, la résolution est totalement explicite. Avec des conditions aux limites classiques, cette méthode de projection est d'ordre 1 en Δt . Pour augmenter l'ordre de précision, le calcul de la pression ∇p^n peut être incorporé dans l'étape de prédiction afin de mieux évaluer \mathbf{u}^* . Les termes visqueux peuvent être implicités également, ce qui revient à calculer \mathcal{E}^* . Cependant, il n'est pas facile d'impliciter le tenseur des contraintes visqueuses lorsqu'il existe des sauts à l'interface.

1.4.2 Méthode du lagrangien augmenté

La méthode standard du lagrangien augmenté a été introduite par Fortin et Glowinski [39]. C'est une méthode itérative de prédiction/correction qui consiste à résoudre le point-selle d'un problème d'optimisation par un algorithme d'Uzawa [155]. A partir d'un champ de pression initial, un terme de contrainte supplémentaire est ajouté aux équations de Navier-Stokes. Un nouveau champ de pression est alors calculé grâce à une équation de continuité modifiée. Un seuil basé sur le degré de précision souhaitée sur la divergence (que l'on souhaite annuler) stoppe le processus itératif. L'algorithme à résoudre est alors le suivant :

- Initialisation : $(\mathbf{u}^{m=0}, p^{m=0}) = (\mathbf{u}^n, p^n)$ où n où (\mathbf{u}^n, p^n) est la solution au temps n
- Tant que $\nabla \cdot \mathbf{u}^m > \text{seuil}$ faire

$$\begin{aligned} \rho^n \left(\frac{\mathbf{u}^{m+1} - \mathbf{u}^m}{\Delta t} + (\mathbf{u}^m \cdot \nabla) \mathbf{u}^{m+1} \right) - \underbrace{r \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}^{m+1})}_{\text{terme du lagrangien augmenté}} = \\ -\nabla p^m + \rho^n \mathbf{g} + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u}^{m+1} + {}^T \nabla \mathbf{u}^{m+1})] \\ p^{m+1} = p^m - r \nabla \cdot \mathbf{u}^{m+1} \end{aligned}$$

où r est un paramètre réglable

$$(\mathbf{u}^m, p^m) = (\mathbf{u}^{m+1}, p^{m+1})$$

– Finalement, la solution est :

$$(\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}) = (\mathbf{u}^m, p^m)$$

Pour les problèmes diphasiques, turbulents et instationnaires, la méthode standard du lagrangien augmenté est améliorée, comme proposé par Vincent *et al.* [162]. La méthode du lagrangien augmenté peut également être couplée à une méthode de projection vectorielle [19]. Les champs (\mathbf{u}^*, p^*) lors de l'étape de prédiction de la projection vectorielle sont calculés par la technique du lagrangien augmenté [39].

1.5 Les équations pour les écoulements multiphasiques

Les équations que nous venons d'établir sont valides à l'intérieur d'un même fluide. Les écoulements multiphasiques que nous allons traiter sont dits à phases séparées par une interface et immiscibles. Les deux fluides sont strictement séparés par une interface matérielle, et cette interface apparaît comme une condition limite pour les deux fluides. Loin de l'interface, les équations précédemment établies sont valables pour décrire l'évolution du fluide. À l'interface, la continuité du tenseur des contraintes impose les conditions de saut. L'interface apparaît alors comme un hyperplan (espace de codimension 1). Son épaisseur est supposée nulle et les propriétés des fluides changent brutalement à travers son passage.

1.5.1 La tension superficielle

On suppose que deux fluides (par exemple deux huiles A et B) sont au repos et séparés par une interface. La configuration est représentée sur la figure 1.1. Les cercles représentent

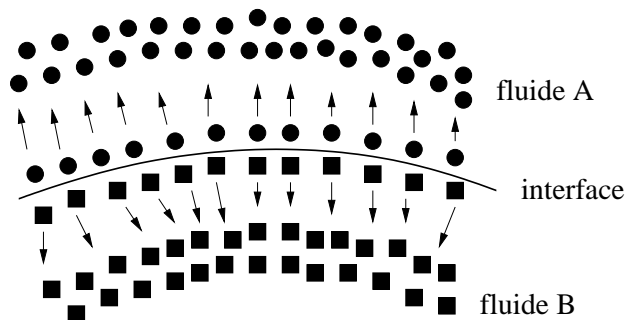


FIGURE 1.1 – Configuration d'une interface avec deux fluides A et B. Les cercles représentent les molécules dans le fluide A. Les carrés, les molécules dans le fluide B.

les molécules dans le fluide A, et les carrés, les molécules dans le fluide B. Au sein d'une même phase, les molécules s'attirent (sinon elles ne formeraient pas une phase). Loin de l'interface, chaque molécule est attirée dans toutes les directions par les molécules voisines, ce qui induit une résultante des forces nulle. Si on se place dans le fluide A proche de l'interface, les molécules sur l'interface subissent l'attraction des molécules plus profondes dans le fluide A, mais pas d'attraction de l'autre côté (à cause de l'interface qui interdit aux molécules du fluide A de pénétrer dans le fluide B). Ce déséquilibre résulte en une force dirigée vers l'intérieur du fluide A. L'hypothèse de fluides immiscibles induit également

que les molécules du fluide B repoussent les molécules du fluide A à l'interface. Tout ce raisonnement est également valable pour le fluide B. Ainsi, il naît une force sur l'interface dirigée vers l'intérieur de chaque fluide. Ces forces compensent le déséquilibre provoqué par l'existence d'une interface séparant strictement les fluides A et B. Cette force a pour effet de minimiser l'aire de l'interface afin de minimiser le déficit énergétique. La différence énergétique des liaisons intermoléculaires entre deux fluides s'exprime à travers le coefficient de tension de surface σ . Pour le cas de fluides au repos, le saut de pression à travers l'interface est donné par la relation de Laplace :

$$p_A - p_B = \sigma (1/R_A + 1/R_B) = \sigma \kappa$$

où R_A et R_B sont les rayons de courbures principaux en un point donné de l'interface, et κ la courbure locale au point considéré de cette interface.

1.5.2 Conditions de saut à travers une interface : cas général

La relation de Laplace est une simplification des relations de saut à l'interface dans le cas d'une interface immobile. Dans le cas général, la contribution des termes visqueux doit être prise en compte. Ainsi, le saut du tenseur des contraintes \mathbf{T} dans les directions normale et tangentielle à l'interface est donné par :

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot [\mathbf{T}] \cdot \mathbf{n} &= \sigma \kappa \\ \mathbf{t} \cdot [\mathbf{T}] \cdot \mathbf{n} &= 0 \end{aligned} \tag{1.11}$$

que l'on peut réécrire :

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot [p \mathbf{I} - \mu(\nabla \mathbf{u} + {}^T \nabla \mathbf{u})] \cdot \mathbf{n} &= \sigma \kappa \\ \mathbf{t} \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + {}^T \nabla \mathbf{u})] \cdot \mathbf{n} &= 0 \end{aligned} \tag{1.12}$$

où $[\cdot]$ désigne le saut d'une grandeur à l'interface entre les deux fluides. \mathbf{n} est le vecteur normal à l'interface et \mathbf{t} le vecteur tangent. Le champ de vitesse est continu à la traversée de l'interface et on a :

$$[\mathbf{u}] = 0 \tag{1.13}$$

La version de l'équation (1.12) n'est pas utilisable en l'état pour une intégration numérique directe. Regardons comment simplifier les équations (1.12) en s'attardant sur la version 2D. Les formules pour le cas 3D sont une simple extension. Si le vecteur vitesse \mathbf{u} a pour composantes (u, v) et le vecteur \mathbf{n} pour composantes n_x, n_y , alors, on peut écrire :

$$\mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{u} + {}^T \nabla \mathbf{u}) = \begin{pmatrix} 2\nabla u \cdot \mathbf{n} \\ 2\nabla v \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n_y \frac{\partial v}{\partial x} - n_x \frac{\partial u}{\partial y} \\ n_x \frac{\partial u}{\partial y} - n_y \frac{\partial v}{\partial x} \end{pmatrix}$$

Et alors naturellement :

$$\mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{u} + {}^T \nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = \begin{pmatrix} 2\nabla u \cdot \mathbf{n} \\ 2\nabla v \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n}$$

Alors la première équation de (1.12) se réécrit :

$$[p] - \left[2\mu \begin{pmatrix} \nabla u \cdot \mathbf{n} \\ \nabla v \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} \right] \cdot \mathbf{n} = \sigma \kappa$$

Après quelques développements présentés notamment dans [58], l'incompressibilité des fluides se traduit par :

$$\left[\begin{pmatrix} \nabla u \cdot \mathbf{n} \\ \nabla v \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n} \right] = 0$$

Et finalement de saut de pression à l'interface devient :

$$[p] - 2[\mu] \begin{pmatrix} \nabla u \cdot \mathbf{n} \\ \nabla v \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n} = \sigma \kappa$$

ce qui s'implémente très facilement dans un code une fois que la normale à l'interface est connue. Le saut ne porte plus que sur la viscosité μ , qui est constante au cours du temps si l'écoulement est isotherme. Toujours dans un souci d'intégration numérique, analysons le terme visqueux de l'équation de Navier-Stokes (1.9) : $\nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + {}^T \nabla \mathbf{u})]$. Le saut dans la direction tangentielle (Eq. (1.12)) du tenseur des contraintes permet le calcul du saut de la dérivée de vitesse à l'interface. La difficulté majeure provient de la discrétisation du terme visqueux qui est effectuée dans une base cartésienne, alors que le saut dans la direction tangentielle est exprimée dans la base locale. Kang [58] exprime le saut de la dérivée de la vitesse à l'interface dans la base cartésienne. Cette formulation est adaptée à une discrétisation numérique du terme visqueux dans Navier-Stokes.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} [\mu u_x] [\mu u_y] \\ [\mu v_x] [\mu v_y] \end{pmatrix} &= [\mu] \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{t} \end{pmatrix}^t \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{t} \end{pmatrix} \\ &+ [\mu] \mathbf{n}^t \mathbf{n} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix} \mathbf{n}^t \mathbf{n} \\ &- [\mu] \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{t} \end{pmatrix}^t \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix}^t \mathbf{n}^t \mathbf{n} \end{aligned}$$

Les équations de Navier-Stokes incompressibles ont été présentées. Dans le cas d'écoulements multiphasiques, elles sont résolues dans chaque phase et les conditions de saut à l'interface apparaissent comme une condition limite qui couple les deux phases. La condition limite à l'interface est basée sur le saut du tenseur des contraintes et la continuité des vitesses. Les projections dans les directions normale et tangentielle de ces sauts ont été exprimées dans la base cartésienne de discrétisation des équations, ce qui rend naturelle l'intégration numérique des sauts. L'interface qui sépare les deux phases est une interface matérielle qu'il convient de suivre au cours du temps. La précision de la méthode employée garantit l'exactitude quant à l'application des sauts. Les méthodes de capture d'interface font l'objet du prochain paragraphe.

Chapitre 2

Les méthodes de capture d'interface

Sommaire

2.1	Les méthodes de front-tracking	34
2.2	Les méthodes de front-capturing	37
2.2.1	Méthodes VOF	37
2.2.2	Les méthodes level-set	41

On rappelle ici que la modélisation retenue est celle des écoulements diphasiques à phases séparées par une interface. Nous nous attachons ici à décrire l'interface (qui est matérielle) ainsi que son évolution. A l'échelle moléculaire, une interface correspond à une zone de transition où la masse volumique passe progressivement d'une valeur dans la phase 1 à une autre valeur dans la phase 2. La taille de la zone de transition est de l'ordre de quelques libres parcours moyens des molécules. L'équation de Cahn-Hilliard permet de décrire les interfaces comme une zone continue de transition dans le cas de fluides non miscibles [2]. De façon plus classique, notre approche consistera à considérer l'interface comme une surface de discontinuité pour la masse volumique. Ainsi, l'interface discontinue est placée quelque part dans la zone de transition entre les deux phases. Le critère pour la localisation exacte de l'interface dans cette zone de transition est la conservation de la masse des deux phases.

Au cours du temps, les fluides sont en mouvement, et la position relative des deux phases change, ce qui entraîne des modifications topologiques pour l'interface. Plusieurs techniques numériques ont été développées pour localiser précisément l'interface, pour suivre son mouvement au cours du temps et prendre en compte ses changements topologiques (cassures et reconnections de l'interface). Ces techniques peuvent être classées selon deux classes. La première classe considère l'interface comme une frontière entre deux domaines. Cette approche permet de prendre en compte les sauts à l'interface de façon très précise. Cependant, des grilles déformables sont nécessaires pour suivre le mouvement de l'interface. Ces méthodes peuvent s'avérer complexes et coûteuses. La deuxième classe de suivi d'interface utilise une grille fixe Navier-Stokes et les grandeurs telles la vitesse à l'interface sont interpolées à partir du champ eulérien. Des schémas spécifiques pour l'advection de l'interface sont nécessaires pour garder la précision du front. Les méthodes numériques où l'interface évolue librement dans le cas où la grille sous-jacente reste fixe se sont avérées très efficaces pour rendre compte de phénomènes complexes tels la fragmentation où la coalescence. Les travaux pionniers dans ce domaine sont ceux de Harlow et Welch [47]. Des particules sans masse sont réparties dans une des phases et sont advectées de façon lagrangienne. La phase

ensemencée est représentée par la présence ou non de marqueurs dans la cellule de calcul. Bien qu'originale, cette technique n'est plus utilisée aujourd'hui à cause notamment d'une absence de précision quant à la localisation exacte de l'interface. De nouvelles techniques ont été élaborées pour suivre l'évolution de l'interface. Elles appartiennent à deux grandes familles : les méthodes de front-tracking et les méthodes de front-capturing.

Les méthodes de front-tracking utilisent des marqueurs pour suivre l'interface. Ces méthodes (Tryggvason [154, 114]) utilisent une seconde grille mobile sur laquelle l'interface est décrite et où la courbure est calculée précisément. Ces techniques peuvent devenir très coûteuses lorsque le nombre de particules augmente. Le *reseeding* (réensemencement) [154] est une des contraintes des méthodes lagrangiennes. Le *reseeding* consiste à enlever ou rajouter des particules dans les zones où respectivement la dynamique de l'écoulement a provoqué une accumulation ou une carence en particules. Cette procédure peut être optimisée par l'utilisation de listes doublement chaînées qui assurent la connectivité des particules. Cette connectivité permet un calcul très précis de la courbure. Nous y reviendrons plus tard. Une autre difficulté est le traitement des changements topologiques de l'interface qui ne sont pas pris en compte de façon automatique par les méthodes lagrangiennes. Un critère physique est nécessaire pour réaliser la séparation ou la coalescence de deux morceaux d'interface. Encore une fois, la connectivité entre les marqueurs est en cause. Cependant, de récents développements concernant les méthodes de front-tracking [57, 148, 129] permettent aux interfaces de se séparer ou de coalescer de façon naturelle. Ces techniques se passent de la connectivité des particules.

Les méthodes de front-capturing utilisent une fonction scalaire pour repérer l'interface. Parmi ces méthodes, la méthode level-set [103, 143, 128] représente l'interface comme l'iso-surface zero d'une fonction distance signée que l'on appelle la fonction level-set. Le principal défaut de la méthode level-set est la perte de masse au cours du temps. Ses atouts majeurs relèvent dans la simplicité de son implémentation numérique. De plus, la fonction level-set étant une ligne de niveau, les caractéristiques géométriques comme la normale à l'interface sont naturellement définies. Les méthodes VOF (Volume Of Fluid) [54, 174, 67] sont également très largement utilisées. Le principe de ces méthodes repose sur le transport de la fraction volumique (appelée la fonction couleur) variant de 0 à 1 et décrivant le taux de présence d'une des phases dans la cellule de calcul. Le principal inconvénient de cette méthode réside dans la complexité de la reconstruction de l'interface. En revanche, les méthode VOF conservent la masse de façon intrinsèque.

Nous nous proposons maintenant d'entrer un peu plus en détail dans chacune des méthodes de suivi d'interface présentées.

2.1 Les méthodes de front-tracking

Les travaux précurseurs de Harlow et Welch [47] proposent de répartir des particules sans masse à l'intérieur de l'une des phases¹(voir Fig. 2.1). L'interface est alors représentée par l'enveloppe de l'ensemble des particules. Limitée aux écoulements à surface libre, cette méthode est incapable de localiser précisément l'interface. De plus l'accès aux paramètres

1. Cette méthode n'entre pas rigoureusement dans la classe "méthode front-tracking" puisque les particules ne sont pas réparties sur l'interface. En revanche, comme les méthodes de front-tracking, c'est une méthode qui a une vision lagrangienne de l'interface (via l'utilisation de particules). C'est à ce titre que cette méthode figure dans cette partie.

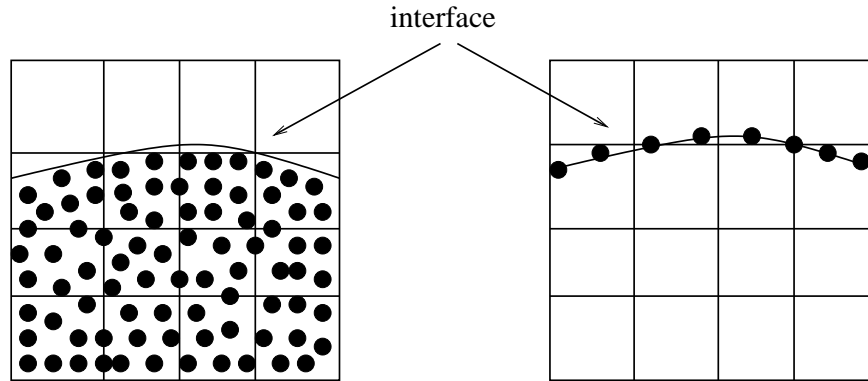


FIGURE 2.1 – Méthodes lagrangiennes. A gauche : marqueurs en volume. A droite : marqueurs en surface ou de fronts. Les cercles noirs sont des marqueurs sans masse.

géométriques tels que la normale ou la courbure n'est pas immédiat avec cette méthode. La zone concernée par l'ensemencement des particules doit rester confinée au voisinage de l'interface pour limiter les ressources informatiques qui grossissent notamment lorsque l'interface est fortement perturbée.

Les marqueurs en volume ont souvent été abandonnés au profit de marqueurs en surface (Fig. 2.1). L'interface est alors représentée par une liste connectée de marqueurs. Chaque marqueur est advecté de façon lagrangienne, et la position de l'interface à chaque instant est fournie par la liste de marqueurs. Souvent, la vitesse nécessaire pour l'advection du marqueur n'est pas connue exactement à l'endroit où se trouve le marqueur, et une interpolation est nécessaire pour transporter l'information de la grille eulérienne vers la grille lagrangienne. La communication permanente entre la grille eulérienne et les marqueurs, et la perte de précision qui en découle est une des faiblesses des méthodes lagrangiennes. Les particules, sans masse, sont soumises à la dynamique de l'écoulement. Il apparaît donc naturellement des zones denses en particules là où la dynamique de l'écoulement est faible. En revanche, les zones où la dynamique de l'écoulement est forte peuvent voir apparaître des carences en particules. Ce phénomène est mis en évidence sur la figure 2.2. L'écoulement est un tourbillon centré dans

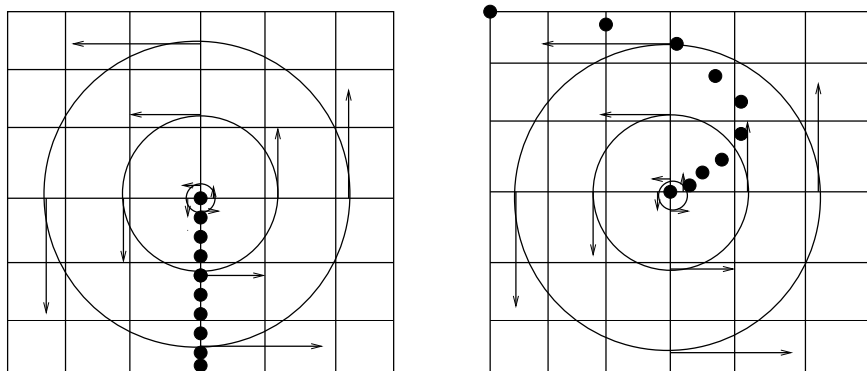


FIGURE 2.2 – Problème du *reseeding* avec les méthodes de front-tracking. A gauche : configuration initiale. A droite : configuration après un temps donné.

le domaine de calcul. Une répartition linéique de particules constitue la condition initiale. En moyenne, une maille est constituée de trois particules, ce qui assure une surrésolution

de l'interface. Au cours du temps, les particules périphériques se déplacent plus vite que les particules proches du centre du domaine. Ceci provoque un étirement de la répartition initialement linéique. Au bout de quelques rotations, on observe une sous-résolution à la périphérie (moins de 1 particule par cellule de calcul) et une accumulation au centre de la boîte. Ainsi, un réensemencement (*reseeding*) des particules est nécessaire. Là encore, l'ajout de particules est réalisé via des extrapolations ce qui peut faire chuter l'ordre de la méthode.

Un problème encore plus pointu avec les méthodes de front-tracking est la connexion et la rupture de l'interface qui ne se fait pas de façon automatique. Un exemple est donné sur la figure 2.3. C'est la configuration de l'instabilité de Rayleigh-Taylor proposée par Puckett

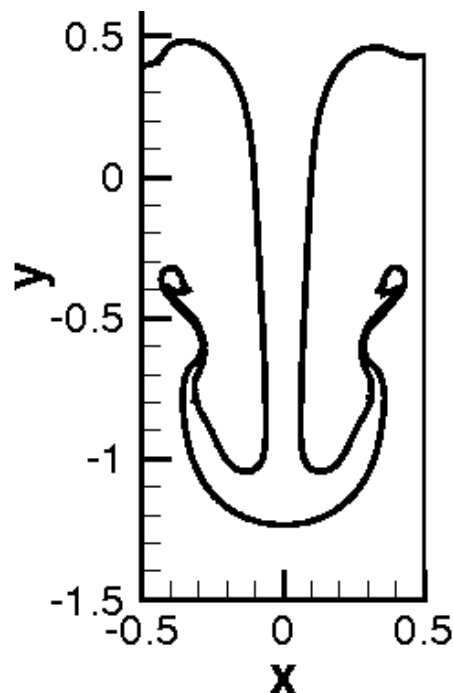


FIGURE 2.3 – Instabilité de Rayleigh-Taylor. $t = 0.9 s$. Méthode de front-tracking 64×256 . 3 particules par maille.

[117]. Le maillage contient 64×256 cellules. La méthode de suivi d'interface est une méthode de front-tracking avec initialement 3 particules par maille. La figure 2.3 représente l'évolution de l'instabilité dans sa phase non linéaire à l'instant $t = 9 s$. Aux extrémités droite et gauche du "champignon" se développent des filaments très fins dont l'épaisseur est largement inférieure à la taille de maille. Le traitement lagrangien autorise des filaments infiniment fins, ce qui n'est pas validé par la physique qui impose que les filaments se cassent pour donner deux composantes connexes par arcs distinctes. Il faut alors avoir recours à des algorithmes coûteux et souvent arbitraires pour réaliser la connexion et la rupture d'une interface.

L'extension aux configurations 3D est rendue difficile à cause de la connectivité des marqueurs. Dans leur travaux [129], Shin et Juric utilisent une méthode de front-tracking sans connectivité. Leur méthode gère automatiquement les connexions et les ruptures des interfaces et l'extension tridimensionnelle se fait sans problème. Le principe repose sur deux représentations différentes de l'interface :

- L'interface représentée explicitement par des marqueurs (non connectés).

– Une fonction indicatrice I dont la ligne de niveau 0.5 représente aussi l'interface. $I(\mathbf{x}, t)$ est déterminée en résolvant l'équation de Poisson suivante :

$$\nabla^2 I = \nabla \cdot \int_{\Gamma(t)} \mathbf{n} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) ds \quad (2.1)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal unitaire à l'interface et $\mathbf{x}_f = \mathbf{x}(s, t)$ est une paramétrisation de l'interface $\Gamma(t)$. $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f)$ est la fonction delta, non nulle uniquement aux points \mathbf{x}_f . Ainsi, si l'interface est représentée par une série de marqueurs dont l'ensemble des positions forme l'ensemble \mathbf{x}_f , l'équation (2.1) permet de déterminer la fonction indicatrice I . Réciproquement, si la fonction I est connue, l'interface est reconstruite de façon linéaire de façon à ce que localement dans chaque maille, l'interface reconstruite vérifie le taux de présence de la phase 1 imposé par la fonction I . Comme la reconstruction est linéaire, chaque extrémité de segment sur une maille coïncide avec les extrémités des segments des cellules voisines. Ainsi, les marqueurs sont connectés physiquement mais pas logiquement.

Ainsi l'avantage des méthodes de front-tracking réside dans leur résolution sous-maille de l'interface. Mais les problèmes de connectivité, de réensemencement (*reseeding*) et de changements de topologies en font des méthodes lourdes, surtout en 3D. Maintenant, les méthodes de front-capturing vont être exposées.

2.2 Les méthodes de front-capturing

2.2.1 Méthodes VOF

Historiquement, la méthode VOF (Volume Of Fluid) est la première méthode de suivi d'interface qui utilise l'advection d'un champ scalaire pour localiser le front. DeBar [30] fut l'un des premiers à mettre en œuvre un algorithme VOF dans une méthode eulérienne 2D pour modéliser les écoulements multiphasiques compressibles. Un autre algorithme de ce type est la méthode SLIC (Simple Line Interface Calculation) de Noh et Woodward [102]. On peut aussi citer l'algorithme de Hirt et Nichols [54]. A chaque pas de temps, la mise à jour de l'interface repose sur deux étapes :

- L'advection de la fonction couleur qui représente implicitement l'interface
- La reconstruction géométrique de l'interface à partir de la fonction couleur

La fonction couleur

On définit une fonction caractéristique χ de la façon suivante :

$$\begin{cases} \chi(\mathbf{x}) = 0 & \text{si } \mathbf{x} \text{ est dans la phase 1} \\ \chi(\mathbf{x}) = 1 & \text{si } \mathbf{x} \text{ est dans la phase 2} \end{cases}$$

La fonction χ est solution d'une équation de transport :

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

\mathbf{u} étant le champ de vitesse eulérien. L'interface est alors représentée par le lieu des discontinuités de χ . La fonction χ ainsi présentée n'est pas utilisable en l'état pour une représentation

discontinue. Nous introduisons alors l'équivalent discret de la fonction χ . Nous la noterons C_{ijk} pour représenter la fonction couleur au point de maillage (i, j, k) . C_{ijk} représente le taux de présence de la phase 2 (compris entre 0 et 1) moyenné sur la cellule de calcul (i, j, k) . La fonction C_{ijk} est alors définie ainsi au point (i, j, k) :

$$C_{ijk} \cdot \mathcal{V}_{ijk} = \iiint_{\mathcal{V}_{ijk}} \chi(\mathbf{x}) d\mathcal{V}$$

où \mathcal{V}_{ijk} désigne le volume de la cellule (i, j, k) . La fonction C_{ijk} correspond strictement à la variable conservative au sens des volumes finis, issue de la fonction caractéristique χ . Le principe de calcul de C est représenté sur la figure 2.4 dans le cas 1D. L'interface est localisée

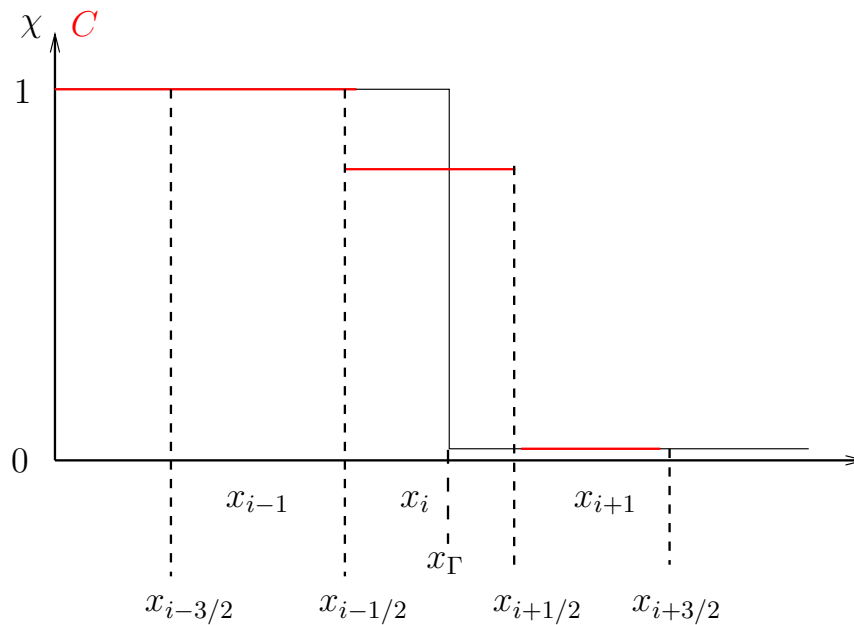


FIGURE 2.4 – Equivalent discret C pour la fonction couleur χ .

à l'abscisse x_Γ . La fonction couleur C_{ijk} obéit à l'équation de transport suivante (écrite sous formes non-conservative et conservative).

$$\frac{\partial C_{ijk}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C_{ijk} = 0 \tag{2.2a}$$

$$\frac{\partial C_{ijk}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} C_{ijk}) = 0 \tag{2.2b}$$

L'équation 2.2 est une loi de conservation hyperbolique. La littérature concernant la résolution numérique de ce type d'équation est très riche. Une formulation conservative assure la conservation de la masse. La figure 2.5 donne une représentation de la fonction couleur C dans un cas 2D. Dans cet exemple, C vaut 1 dans la phase représentée en gris. La fonction couleur n'est pas continue, c'est pourquoi l'équation d'advection 2.2 n'est pas résolue directement².

2. On peut noter cependant un certain nombre de travaux dans lesquels l'équation (2.2a) est résolue directement par un schéma dédié aux équation hyperboliques avec des résultats consistents [160]. L'équation d'advection pour la fonction couleur est discrétisée directement par un schéma TVD (sans reconstruction géométrique) [160]

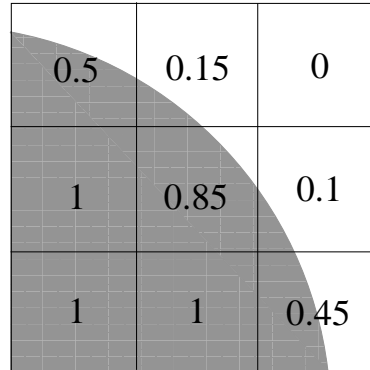


FIGURE 2.5 – Fonction couleur pour la méthode VOF

En effet, la diffusion numérique lisse les discontinuités ce qui pose des problèmes pour la localisation des portions fines ou petites d’interfaces. Afin de palier à ce problème, une étape de reconstruction de l’interface est opérée avant la phase d’advection de la fonction couleur. Ceci permet une reconstruction des flux numériques dans l’équation (2.2) grâce à des considérations géométriques.

Reconstruction géométrique de l’interface

Le papier de Pilliod et Puckett [109] offre une revue assez complète des différentes techniques de reconstruction de l’interface par la méthode VOF. Les algorithmes de reconstruction offrent en général une approximation linéaire de l’interface dans chaque cellule. En revanche, ces approximations ne sont pas continues : seule la continuité par morceaux est vérifiée. Une telle approximation linéaire de l’interface dans chaque cellule ne permet pas d’obtenir une précision au second ordre. Le second ordre n’est atteint que si l’algorithme reproduit l’interface linéaire de façon exacte. Les algorithmes LVIRA [116] et ELVIRA [108] sont précis au second ordre. A partir de la fonction couleur, tous les algorithmes (excepté SLIC) déterminent le vecteur normal à l’interface local à partir des fractions volumiques données par la fonction C dans les cellules voisines.

Strictelement limité au cas 1D, l’algorithme SLIC (Simple Line Interface Calculation) original de Noh et Woodward [102] fut amélioré par Chorin [25]. Dans la méthode SLIC, l’interface reconstruite est composée de segments alignés avec le maillage. La hauteur du segments est fixé par la valeur de C locale. Le caractère horizontal ou vertical du segment est déterminé à partir d’un stencil 3×1 (ou 3×3) basé sur les valeurs de C pour les cellules voisines. La figure 2.6 montre un exemple de reconstruction SLIC. Evidemment, la méthode SLIC est au mieux du premier ordre. Elle n’est plus guère employée.

Les méthodes dites PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation) cherchent à déterminer la normale locale à l’interface pour une reconstruction C^0 par morceaux de l’interface tout en conservant la masse. Une reconstruction PLIC est proposée sur la figure 2.6. On se propose d’exposer quelques algorithmes classiques de reconstruction de l’interface.

Saltzman [118] propose un algorithme appelé algorithme du centre de masse. La phase 1 est affectée de la densité 1 alors que la phase 2 voit sa densité réduite à 0. A partir de la redéfinition des densités, le centre de masse du stencil 3×3 autour de la cellule considérée est calculé. Le vecteur unitaire tracé entre ce centre de masse et le centre de la cellule de calcul

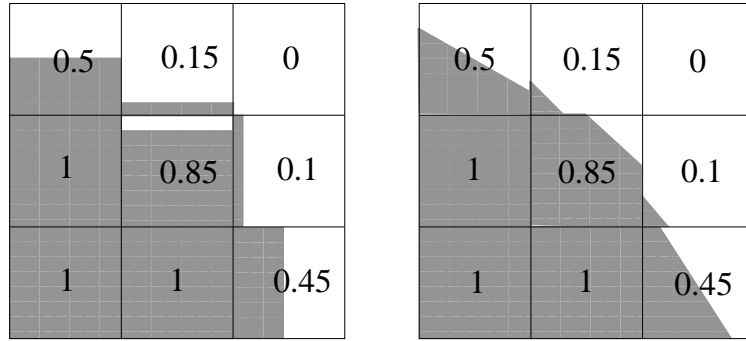


FIGURE 2.6 – Etape de reconstruction de l'interface de la méthode VOF. Gauche : reconstruction SLIC. Droite : reconstruction PLIC.

est pris pour vecteur unitaire local de l'interface reconstruite. Cette méthode est également au mieux du premier ordre.

Une autre technique de reconstruction de l'interface est basée sur un algorithme aux différences centrées. Pour connaître la pente de l'interface dans la cellule (i, j) (on expose la méthode en 2D ici), un stencil 3×3 est utilisé. La pente en (i, j) est approximée par la demi différence entre la somme des fractions volumiques de la colonne de droite et la somme des fractions volumiques de la colonne de gauche. En d'autres termes, si \tilde{m} désigne la pente approchée :

$$\tilde{m} = \frac{1}{2} \sum_{k=-1}^1 C_{i+1,j+k} - C_{i-1,j+k}$$

Dans la configuration de la figure 2.6, la pente dans la cellule centrale est donnée par $\frac{(0.45 + 0.1 + 0) - (1 + 1 + 0.5)}{2} = -0.975$. Cette méthode est précise si l'interface intersecte des côtés opposés du stencil 3×3 . En revanche la reconstruction est erronée si l'interface intersecte des côtés adjacents du stencil (cf [109]). C'est pourquoi la méthode n'est pas du second ordre.

La méthode de Parker et Youngs [104] fournit une approximation de ∇C qui est utilisée comme vecteur normal à l'interface. Cette méthode est encore une méthode du premier ordre puisqu'elle induit une erreur en $\mathcal{O}(1)$ sur le calcul de la pente de l'interface.

La méthode LVIRA (Least squares Volume of fluid Interface Reconstruction Algorithm) de Puckett [116] tente de minimiser la différence entre la fonction couleur et une approximation linéaire de cette dernière. Le stencil considéré est un stencil 3×3 et l'approximation linéaire est exacte au centre du stencil. Ainsi, le problème à résoudre est le suivant :

$$\begin{cases} E_{i,j}^2(\tilde{m}) = \left(\sum_{k,l=-1}^1 \left(\tilde{C}_{i+k,j+l}(\tilde{m}) - C_{i+k,j+l} \right)^2 \right)^{1/2} \\ \tilde{C}_{i,j} = C_{i,j} \end{cases}$$

avec $E_{i,j}^2(\tilde{m})$ à minimiser et \tilde{C} l'approximation linéaire de C avec la pente \tilde{m} .

La méthode ELVIRA (Efficient Least squares Volume of fluid Interface Reconstruction Algorithm) de Pilliod [108] est une version améliorée de la méthode LVIRA où la pente \tilde{m} est choisie parmi 6 candidats. La méthode ELVIRA est précise au second ordre.

Les algorithmes d'advection

L'équation conservative 2.2 est discrétisée de la façon suivante :

$$C_{i,j,k}^{m+1} = C_{i,j,k}^m + \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i-1/2,j,k} - F_{i+1/2,j,k}) + \frac{\Delta t}{\Delta y} (G_{i,j-1/2,k} - G_{i,j+1/2,k}) + \frac{\Delta t}{\Delta z} (H_{i,j,k-1/2} - H_{i,j,k+1/2}) \quad (2.3)$$

où F , G et H désignent ici les flux dans les directions x , y et z . La reconstruction géométrique de l'interface permet le calcul de ces flux de façon à garantir la conservation de la masse.

Ainsi, les méthodes VOF sont des méthodes qui autorisent les changements topologiques de l'interface de façon automatique. Et la conservation de la masse est assurée grâce à la reconstruction géométrique qui intervient dans le calcul des flux pour le transport de l'interface. Toutefois, la localisation exacte de l'interface n'est pas garantie lors d'une reconstruction PLIC puisque la régularité de l'interface n'est que C^0 . Un manque de précision peut apparaître lors du calcul des quantités géométriques comme le vecteur normal, ce qui peut être dommageable lors du couplage avec les équations de Naviers-Stokes et du calcul des forces de tension de surface.

2.2.2 Les méthodes level-set

Avec les méthodes VOF, les méthodes level-set sont les plus utilisées pour le traitement eulérien du suivi des interfaces. D'après l'idée originale de Osher et Sethian [103], l'interface Γ est représentée par le zéro d'une fonction ϕ . Soit un espace Ω divisé en deux sous-espaces Ω^+ et Ω^- délimités l'un de l'autre par l'hyperplan Γ . La fonction ϕ est ainsi définie :

$$\begin{cases} \Gamma = \{\mathbf{x} \in \Omega, \phi(\mathbf{x}) = 0\} \\ \phi(\mathbf{x}) > 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega^+ \\ \phi(\mathbf{x}) < 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega^- \end{cases} \quad (2.4)$$

Pour limiter les problèmes numériques, on a intérêt à ce que la fonction ϕ soit la plus régulière possible. On choisit pour ϕ la fonction distance signée. Ainsi, chaque point du maillage eulérien connaît à chaque instant sa distance à l'interface et la phase à laquelle il appartient grâce au signe. Ainsi, la fonction level-set ϕ est une variété d'isocontours. L'isocontour $\phi = 0$ représente l'interface. La figure 2.7 montre trois isosurfaces dont l'interface ($\phi = 0$). Pour un point de l'espace (ici par exemple les points A et B), la level-set associée est donnée en déterminant la ligne de niveau qui passe par ce point. Les lignes de niveau étant toutes parallèles les unes aux autres, la level-set en un point est unique.

Un point situé sur l'iso-surface $\phi = \phi_0$ le reste au cours du temps. Ainsi :

$$\frac{d\phi}{dt} = 0$$

ce qui se réécrit aussi :

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

Cette équation est une équation hyperbolique du premier ordre. Cette équation est discrétisée et résolue directement par des schémas d'ordre élevé. Contrairement aux méthodes VOF, il n'y a pas d'étape de reconstruction géométrique, ce qui fait la simplicité de la level-set. Mais, en

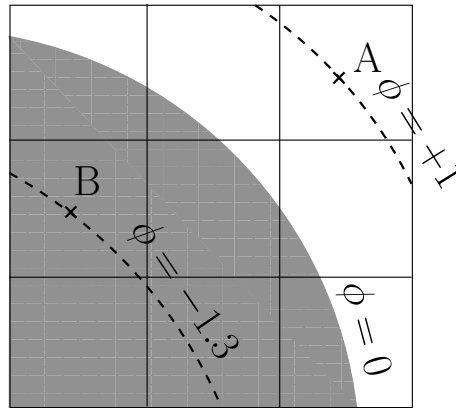


FIGURE 2.7 – Principe de la level-set. Trois iso-contours sont représentées dont l'interface ($\phi = 0$). $\phi(A) = +1$. $\phi(B) = -1.3$

contrepartie, la conservation de la masse n'est pas intrinsèque contrairement aux méthodes VOF. La qualité de la résolution de l'équation d'advection pour ϕ fixe la précision de la localisation de l'interface. Nous nous penchons maintenant sur la résolution numérique de l'équation d'advection.

Résolution de l'équation d'advection pour ϕ

Discrétisation spatiale Les schémas numériques retenus pour résoudre l'équation de transport pour ϕ doivent vérifier les aspects suivants :

- Précision. La précision du schéma utilisé garantit une précision de la localisation de l'interface, ce qui est primordial pour une application précise des sauts à l'interface. Les schémas d'ordre deux s'avèrent bien souvent insuffisants pour le critère de précision. Voir la thèse de Tanguy [144] à ce sujet. Il faudra avoir recours à des schémas d'ordre plus élevé.
- Diffusion. Le schéma utilisé doit être peu diffusif afin de limiter les pertes de masse qui posent déjà problème avec les méthodes level-set de façon intrinsèque.
- Dispersion. Si l'interface peut se décomposer comme la superposition de modes de Fourier (la superposition d'échelles interfaciales de tailles différentes), il est primordial que chaque échelle interfaciale soit transportée à la même vitesse.
- Robustesse. Même si la fonction level-set est extrêmement régulière, le schéma numérique doit être robuste face aux situations de sous-résolution de l'interface, notamment dans les cas de fortes courbures.

Les schémas utilisés pour la discrétisation des termes spatiaux de l'équation (2.5) doivent garantir les propriétés énoncées précédemment. Dans le chapitre suivant, nous allons détailler les différents schémas utilisés pour la discrétisation spatiale de l'équation d'advection de ϕ . Nous comparerons les schémas WENO du 5^{ème} ordre [130, 131, 84] ainsi que des schémas spectraux en formulation volumes finis [167] et différences finies [85].

Discrétisation temporelle L'utilisation de schémas d'ordres élevés pour la discrétisation spatiale de l'équation d'advection (2.5) nécessite un schéma d'ordre élevé également pour la discrétisation temporelle. Un schéma de Runge-Kutta au 3^{ème} ordre (RK3) est utilisé [42].

L'équation (2.5) peut se réécrire :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = L(\phi)$$

où $L(\phi) = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)\phi$. Ici $L(\phi^n)$ désignera la discrétisation du terme spatial dans l'équation d'advection de ϕ au temps t^n . Pour le passage de ϕ^n à ϕ^{n+1} , la méthode RK3 passe par le calcul de deux variables intermédiaires ϕ_1 et ϕ_2 . L'algorithme du RK3 est le suivant :

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \phi^n + \Delta t L(\phi^n) \\ \phi_2 &= \frac{3}{4}\phi^n + \frac{1}{4}(\phi_1 + \Delta t L(\phi_1)) \\ \phi^{n+1} &= \frac{1}{3}\phi^n + \frac{2}{3}(\phi_2 + \Delta t L(\phi_2)) \end{aligned} \tag{2.6}$$

Le schéma RK3 offre une stabilité temporelle TVD.

La redistanciation de la level-set

Au cours de l'advection de la level-set, les iso-surfaces ne restent pas parallèles les unes par rapport aux autres. La figure 2.8 (gauche) représente l'advection d'une interface initialement circulaire dans un champ de vitesses tournoyant. L'interface est cisailée et après quelques itérations, les iso-lignes ne sont plus parallèles entre elles. Il faut alors mettre en œuvre un

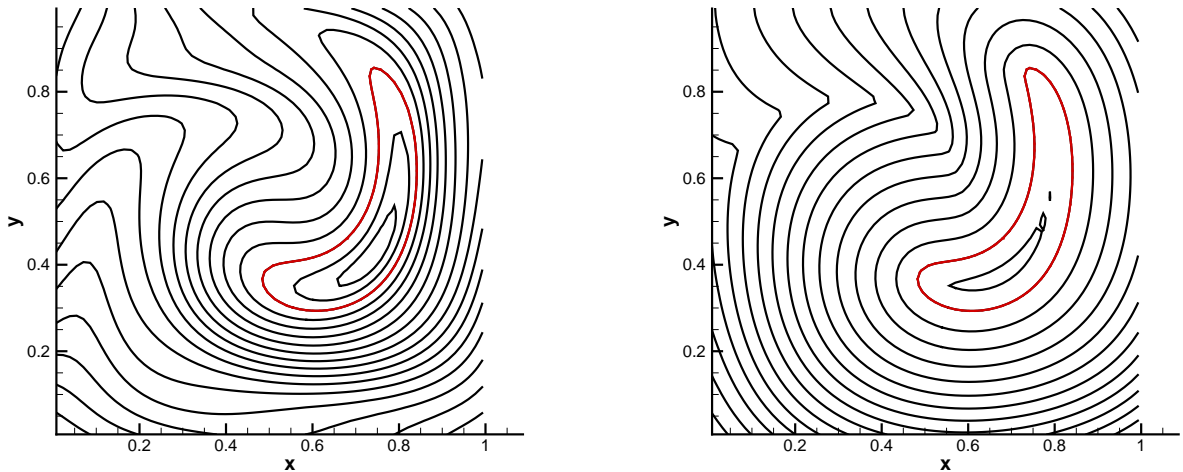


FIGURE 2.8 – Advection de la level-set. L'isosurface $\phi = 0$ est en rouge. Gauche : sans redistanciation. Droite : avec redistanciation. Les deux cas correspondent au même temps de simulation.

algorithme de redistanciation qui puisse garantir que $\|\nabla\phi\| = 1$ à chaque instant (c'est-à-dire que la fonction level set reste bien une fonction distance). Juste une remarque : a priori, l'étape de redistanciation n'est pas nécessaire si seule la position de l'interface nous importe (iso- $\phi = 0$). Mais en fait, la propriété de distance signée sera utile pour l'application des sauts à l'interface, et notamment le calcul de la normale à l'interface.

Sussman [143] a mis au point un algorithme de redistanciation pour ϕ . La méthode part du principe que l'iso-surface $\phi = 0$ qui représente l'interface est bien calculée. Les autres iso-surfaces sont corrigées à partir de la seule iso-surface $\phi = 0$. Pour ce faire, l'équation suivante de redistanciation est résolue :

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t'} = \text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t)) (1 - \|\nabla \tilde{\phi}\|) \\ \tilde{\phi}(\mathbf{x}, t' = 0) = \phi(\mathbf{x}, t) \end{cases} \quad (2.7)$$

le temps t' est un temps fictif et la solution stationnaire de l'équation (2.7) est bien une fonction distance ($\|\nabla \tilde{\phi}\| = 1$), sans que l'iso-surface $\phi = 0$ ait été modifiée. En pratique, la résolution de l'équation de redistanciation modifie la position de l'interface (à cause des erreurs de discrétisation). Elle a notamment tendance à "épaissir" l'interface et à "arrondir" les angles. La figure 2.8 (droite) représente la même situation que la figure de gauche, sauf qu'à droite, la redistanciation a été opérée.

On peut réécrire l'équation (2.7) sous une forme d'équation de convection hyperbolique :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t'} + \left(\text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t)) \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \right) \cdot \nabla \phi = \text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t)) \quad (2.8)$$

Cette formulation met en évidence que l'information nécessaire pour redistancier les iso-surfaces loin de l'interface se propage suivant les caractéristiques issues de l'interface et dans une direction normale à cette dernière. Le problème du croisement des caractéristiques est illustré sur la figure 2.9. Le point M reçoit des informations provenant de caractéristiques

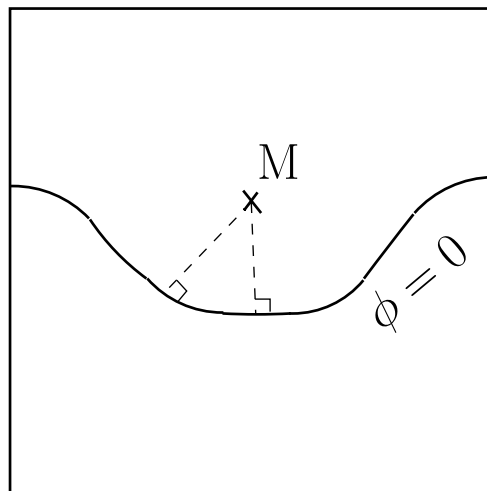


FIGURE 2.9 – Propagation de l'information suivant les caractéristiques issues de l'interface suivant la normale à cette dernière.

issues de deux points différents, ce qui exclue une propagation bijective de l'information pour la redistanciation. La solution à ce problème est l'utilisation du principe de Huygens où la solution est développée en imaginant des fronts d'onde émanant de chaque point de l'interface. L'enveloppe de ces fronts d'onde correspond toujours au principe du "premier arrivé". Ainsi, le croisement des caractéristiques est évité. Les méthodes de fast marching [126] reposent sur le principe de Huygens. Leur utilisation sera détaillée par la suite.

Caractéristiques géométriques locales de l'interface

Un des atouts de la méthode level-set est l'accès immédiat aux propriétés géométriques de l'interface. Ainsi la normale \mathbf{n} et la courbure κ locales à l'interface sont naturellement définies grâce à la fonction level-set.

$$\begin{aligned}\mathbf{n} &= \frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} \\ \kappa &= \nabla \cdot \mathbf{n}\end{aligned}\tag{2.9}$$

Chapitre 3

La discrétisation spatiale de l'équation d'advection de la level-set

Sommaire

3.1 Schémas WENO	47
3.1.1 WENO : version non conservative	48
3.1.2 WENO : version conservative	50
3.2 Schémas spectraux : formulation volumes finis	52
3.2.1 Présentation générale	52
3.2.2 Détail de la méthode dans le cas 1D	54
3.3 Schémas spectraux : formulation différences finies	57

Comme énoncé dans le chapitre précédent, le schéma de discrétisation spatiale de l'équation d'advection de ϕ doit combiner précision (avec un ordre élevé), robustesse ainsi qu'une faible diffusion numérique et une faible dispersion. Pour discrétiser le terme spatial de l'équation d'advection de ϕ , on a utilisé les schémas WENO du 5^{ème} ordre [130, 131, 84] sous leurs versions conservatives et non conservatives ainsi que des schémas spectraux en formulation volumes finis [167] et différences finies [85]. Nous nous proposons maintenant de décrire ces schémas.

3.1 Schémas WENO

Nous présentons ici les schémas WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) proposés par Osher, Shin et Jiang [130, 131, 84] pour la discrétisation spatiale de l'équation 2.5. Les schémas WENO sont une extension des schémas ENO développés plus tôt [132, 133]. Ces schémas ont été développés initialement pour simuler la propagation d'une discontinuité (onde de choc) dans les milieux fluides compressibles. La capture d'une onde de choc nécessite des méthodes très robustes, mais qui limitent tout de même le lissage de la discontinuité (diffusion). C'est pourquoi ces schémas nous semblent adéquat pour discrétiser la partie spatiale de l'équation de transport de la level-set. Nous allons plus particulièrement nous attarder sur les schémas WENO du 5^{ème} ordre (en référence à la taille du stencil de discrétisation), puisque ce sont ces schémas qui ont été utilisés dans notre code. Deux versions des schémas WENO sont utilisés : une version non conservative et une version conservative.

3.1.1 WENO : version non conservative

L'appellation "non conservative" concerne le mode de discrétisation de l'équation d'advection de ϕ qui est écrite ici sous forme non conservative :

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

Conformément à l'étude très détaillée faite dans la thèse de Couderc [26], la présentation sera faite dans le cas 2D. L'équation précédente se réécrit alors :

$$\frac{\partial \phi_{i,j}}{\partial t} + u_{i,j} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j} + v_{i,j} \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{i,j} = 0$$

Ici la référence au temps est omise. Tout repose sur la discrétisation des termes $\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}$ et $\frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{i,j}$. La discrétisation centrée de l'opérateur gradient génère un schéma instable. Le schéma upwinding direction par direction est utilisé et les dérivées sont décentrées du côté d'où provient l'information. Concrètement, ceci revient à :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^- & \text{si } u_{i,j} > 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^+ & \text{si } u_{i,j} < 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

De même pour la direction selon y :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{i,j} = \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{i,j}^- & \text{si } v_{i,j} > 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{i,j} = \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{i,j}^+ & \text{si } v_{i,j} < 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

Pour fixer les idées, si un schéma de type Euler est utilisé pour discrétiser les dérivées, $\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^-$ et $\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^+$ s'expriment ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^- &= \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\Delta x} \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^+ &= \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta x} \end{aligned} \quad (3.3)$$

On a des définitions analogues pour $\frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{i,j}^-$ et $\frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{i,j}^+$.

Le schéma WENO du 5^{ème} ordre (qu'on appellera WENO5 à partir de maintenant) s'applique donc à discrétiser les termes $\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^-$, $\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^+$, $\frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{i,j}^-$ et $\frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{i,j}^+$. Nous détaillons ici la

discrétisation de $\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^-$ et $\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^+$, la discrétisation suivant y étant similaire. La discrétisation repose sur un décentrement du côté upwind, et la discrétisation finale de la dérivée est une combinaison linéaire de 3 dérivées basées sur trois stencils différents. Voir la figure 3.1 pour une présentation des stencils.

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^{\pm} = \sum_{k=0}^2 \omega_k \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^{\pm,k} \quad (3.4)$$

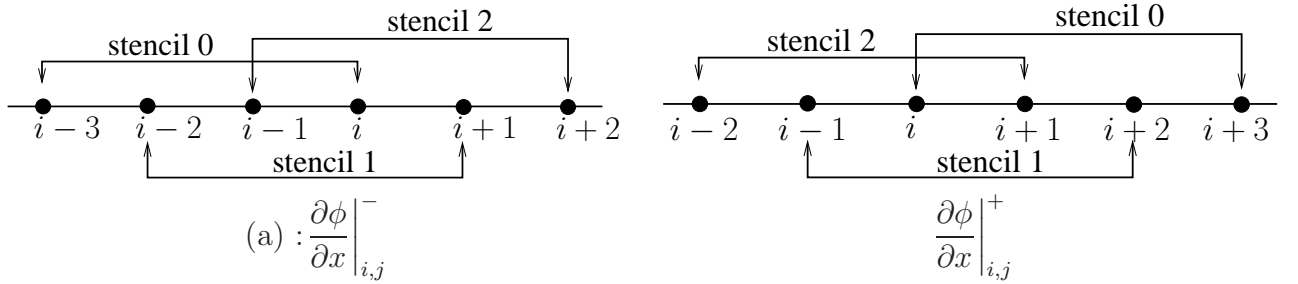


FIGURE 3.1 – Stencils pour les WENO5 dans leur version non conservative.

$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^{\pm,k}$ représente la discrétisation de $\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^{\pm}$ sur le stencil k pour $k \in 0, 1, 2$. On a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^{\pm,0} &= \frac{1}{3} q_1^{\pm} & -\frac{7}{6} q_2^{\pm} + \frac{11}{6} q_3^{\pm} \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^{\pm,1} &= -\frac{1}{6} q_2^{\pm} & +\frac{5}{6} q_3^{\pm} + \frac{1}{3} q_4^{\pm} \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j}^{\pm,2} &= \frac{1}{3} q_3^{\pm} & +\frac{5}{6} q_4^{\pm} - \frac{1}{6} q_5^{\pm} \end{aligned} \quad (3.5)$$

avec

$$\begin{aligned} q_k^- &= \frac{\phi_{i-3+k,j} - \phi_{i-4+k,j}}{\Delta x} \\ q_k^+ &= \frac{\phi_{i+4-k,j} - \phi_{i+3-k,j}}{\Delta x} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Les coefficients ω_k sont tels que $\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1$ (combinaison convexe) et ils ont été calculés de deux façons différentes :

- les ω_k sont fonctions de la régularité de la solution. Le stencil où la solution est localement la plus régulière sera privilégié. ω_k est local à la maille. On parlera dans ce cas de WENO à poids pondérés. Ou bien,
- les ω_k sont fixés de façon à ce que la décomposition suivant les stencils soit optimale. Dans ce cas, les ω_k sont les mêmes pour toutes les cellules de calcul ($\omega_1; \omega_2; \omega_3$) = (0.1; 0.6; 0.3). On parlera dans ce cas de WENO à poids optimum.

3.1.2 WENO : version conservative

Pour la version conservative des schémas WENO5, on utilise la formulation conservative de l'équation d'advection de ϕ .

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = 0 \quad (3.7)$$

Pour une formulation volume fini, on intègre cette solution sur la cellule de calcul (encore une fois, on se limite au cas 2D ici) :

$$\iint_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial \phi}{\partial t} dS + \int_{\partial \Omega_{i,j}} (\mathbf{u} \phi) \cdot \mathbf{n} dl = 0$$

Avec les notations de la figure 3.2, on pose :

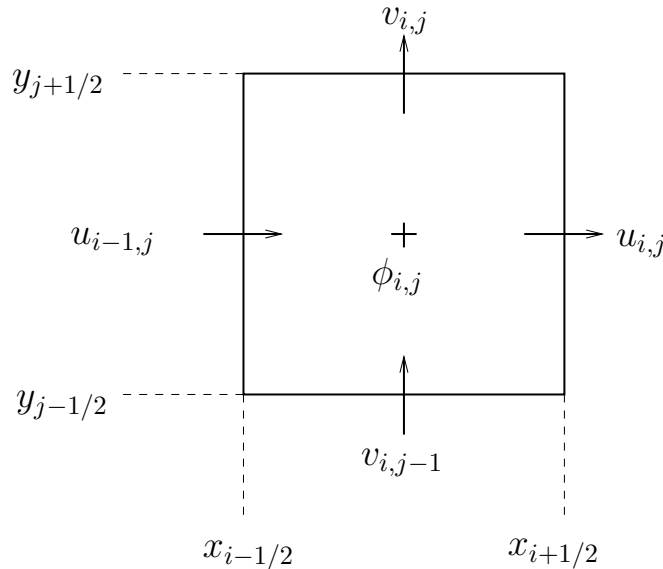


FIGURE 3.2 – Maillage décalé.

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{i,j}^{\text{VF}} &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \phi(x, y) dx dy \\ F_{i+1/2,j} &= \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} u(x_{i+1/2}, y) \phi(x_{i+1/2}, y) dy \approx \Delta y u_{i,j} \phi_{i+1/2,j} \\ G_{i,j+1/2} &= \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} v(x, y_{j+1/2}) \phi(x, y_{j+1/2}) dx \approx \Delta x v_{i,j} \phi_{i,j+1/2} \end{aligned} \quad (3.8)$$

L'équation (3.7) se réécrit alors :

$$\frac{\partial \bar{\phi}^{\text{VF}}}{\partial t} + \frac{F_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j}}{\Delta x} + \frac{G_{i,j+1/2} - G_{i,j-1/2}}{\Delta y} = 0$$

Les schémas WENO5 seront utilisés pour discrétiser les flux $F_{i+1/2,j}$, $F_{i-1/2,j}$, $G_{i,j+1/2}$ et $G_{i,j-1/2}$. A noter que cette fois, la discrétisation WENO5 porte sur la variable ϕ elle-même et

non pas son gradient comme dans la version non conservative. L'explication sera menée pour $F_{i+1/2,j}$ et $G_{i,j+1/2}$. La méthode pour les autres flux étant identique. Les quantités $\phi_{i+1/2,j}$ et $\phi_{i,j+1/2}$ ne sont pas calculées explicitement et elles sont reconstruites par la méthode WENO5, toujours de façon upwind. Ainsi :

$$\begin{cases} F_{i+1/2,j} = \Delta y u_{i,j} \phi_{i+1/2,j}^- & \text{si } u_{i,j} > 0 \\ F_{i+1/2,j} = \Delta y u_{i,j} \phi_{i+1/2,j}^+ & \text{si } u_{i,j} < 0 \end{cases}$$

Et pour la direction y :

$$\begin{cases} G_{i,j+1/2} = \Delta x v_{i,j} \phi_{i,j+1/2}^- & \text{si } v_{i,j} > 0 \\ G_{i,j+1/2} = \Delta x v_{i,j} \phi_{i,j+1/2}^+ & \text{si } v_{i,j} < 0 \end{cases}$$

Pour fixer les idées, la reconstruction de $\phi_{i+1/2,j}^\pm$ au premier ordre est donnée par :

$$\begin{cases} \phi_{i+1/2,j}^- = \phi_{i,j} \\ \phi_{i+1/2,j}^+ = \phi_{i+1,j} \end{cases}$$

On a une définition analogue pour $\phi_{i,j+1/2}^\pm$ au premier ordre. Nous détaillons maintenant la reconstruction pour $\phi_{i+1/2,j}^\pm$ (celle pour $\phi_{i,j+1/2}^\pm$ est analogue). La reconstruction de $\phi_{i+1/2,j}^\pm$ est basée sur une combinaison linéaire de trois reconstructions basées sur trois stencils différents.

$$\phi_{i+1/2,j}^\pm = \sum_{k=0}^2 \omega_k \phi_{i+1/2,j}^{\pm,k}$$

où $\phi_{i+1/2,j}^{\pm,k}$ est la reconstruction basée sur le stencil k . La figure 3.3 illustre le principe de calcul des stencils.

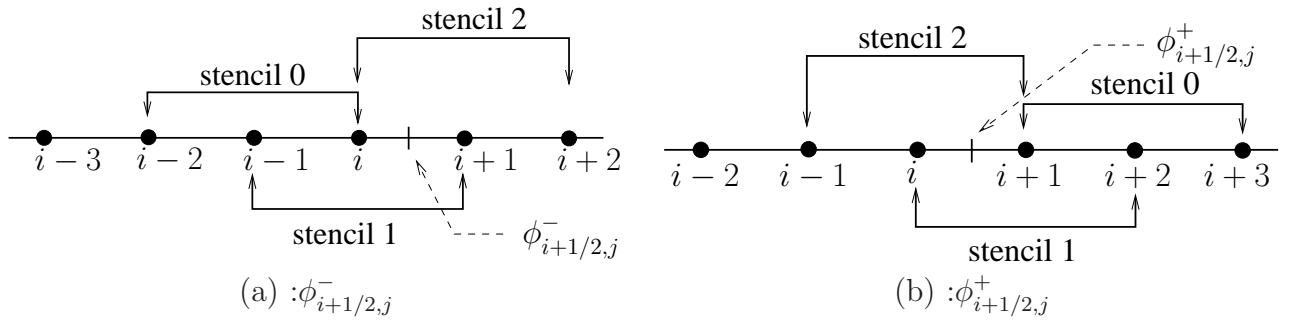


FIGURE 3.3 – Stencils pour les WENO5 dans leur version conservative.

On retrouve une formulation analogue à l'équation (3.5)

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2,j}^{\pm,0} &= \frac{1}{3}q_1^\pm & -\frac{7}{6}q_2^\pm + \frac{11}{6}q_3^\pm \\ \phi_{i+1/2,j}^{\pm,1} &= -\frac{1}{6}q_2^\pm & +\frac{5}{6}q_3^\pm + \frac{1}{3}q_4^\pm \\ \phi_{i+1/2,j}^{\pm,2} &= \frac{1}{3}q_3^\pm & +\frac{5}{6}q_4^\pm - \frac{1}{6}q_5^\pm \end{aligned} \quad (3.9)$$

avec

$$\begin{aligned} q_k^- &= \overline{\phi}_{i-3+k,j}^{\text{VF}} \\ q_k^+ &= \overline{\phi}_{i+4-k,j}^{\text{VF}} \end{aligned}$$

Encore une fois, les coefficients ω_k , peuvent être choisis en fonction de la solution la plus régulière (WENO pondéré) ou bien selon une décomposition optimale (WENO optimum).

Une remarque peut être faite sur l'évaluation du flux à l'équation (3.8). En effet, le flux est supposé constant sur toute la face de la cellule. Pour affiner le calcul du flux, des points peuvent être répartis sur la surface de la cellule afin d'y calculer l'intégrale par une méthode de quadrature. Nous ne l'avons pas codé, mais il s'avère que la précision du flux est nettement améliorée.

3.2 Schémas spectraux : formulation volumes finis

Le concept de la méthode spectrale en formulation volumique est introduite par Wang [167]. La méthode a été développée à la base pour résoudre les lois de conservation sur des maillages non structurés. Le terme "volume spectral" est utilisé pour signifier que l'on obtient de grands ordres de précision comme pour les méthodes d'éléments spectraux. Il n'y a pas ici à proprement parlé de décomposition spectrale (au sens de Fourier). Il faut comprendre "spectral" comme un niveau de précision : une précision d'ordre spectral. Chaque cellule de calcul SV (appelées ici les volumes spectraux) est subdivisée en volumes de contrôle CV. L'originalité de la méthode spectrale tient dans le fait que les valeurs moyennées dans chaque CV sont utilisées pour reconstruire une approximation d'ordre élevé de la solution dans la SV. Ainsi, on a une solution analytique dans chaque SV (grâce à la reconstruction offerte par les CV) et ainsi le flux aux frontières de deux CV est analytiquement connu. Pour les extrémités, c'est-à-dire aux frontières entre deux SV, un flux de Riemann est utilisé pour calculer le flux. Les méthodes de volumes finis classiques reconstruisent les flux aux frontières des SV grâce à des stencils qui s'étendent sur les SV voisines. Ici, l'information pour le calcul des flux provient de l'intérieur de la SV (grâce aux CV). La méthode spectrale proposée est ainsi beaucoup plus compacte. Nous nous proposons d'exposer la méthode dans un cadre très général puis de détailler le cas 1D sur l'advection scalaire.

3.2.1 Présentation générale

On considère l'équation d'advection scalaire 2D :

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(u(x, y, t))}{\partial x} + \frac{\partial g(u(x, y, t))}{\partial y} = 0 \quad (3.10)$$

sur un domaine Ω qui a pour frontière $\partial\Omega$. Ω est divisé en N cellules appelées volumes spectraux (SV). $\Omega = \bigcup_{i=1}^N S_i$. L'intégration de (3.10) sur une SV S_i donne :

$$\int_{S_i} \frac{\partial u}{\partial t} dV + \int_{\partial S_i} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (3.11)$$

où $\mathbf{F} = (f, g)$ et \mathbf{n} la normale extérieure à ∂S_i . La variable moyennée dans la cellule S_i est définie ainsi :

$$\overline{u}_i^{\text{VF}} = \frac{\int_{S_i} u dV}{V_i} \quad (3.12)$$

avec V_i le volume de S_i . Alors, l'équation (3.11) devient :

$$\frac{d\bar{u}_i^{\text{VF}}}{dt} + \frac{1}{V_i} \sum_{r=1}^L \int_{A_r} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (3.13)$$

où L est le nombre de faces de S_i et A_r la $r^{\text{ème}}$ face. Le calcul de l'intégrale sur la surface peut être réalisé par une quadrature de Gauss à l'ordre k :

$$\int_{A_r} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_{j=1}^J w_{rj} \mathbf{F}(u(x_{rj}, y_{rj})) \cdot \mathbf{n}_r A_r + \mathcal{O}(A_r h^k)$$

où w_{rj} et (x_{rj}, y_{rj}) sont respectivement les poids et les points de la quadrature et $h = \max(\Delta x, \Delta y)$. Les points (x_{rj}, y_{rj}) sont dispersés sur la face A_r . La sommation de l'équation précédente sur toutes les faces de la cellule donne :

$$\sum_{r=1}^L \int_{A_r} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_{r=1}^L \sum_{j=1}^J w_{rj} \mathbf{F}(u(x_{rj}, y_{rj})) \cdot \mathbf{n}_r A_r + \mathcal{O}(A_r h^{k+1})$$

Comme $V_i = \mathcal{O}(A_r h^{k+1})$, on a finalement :

$$\frac{d\bar{u}_i^{\text{VF}}}{dt} + \frac{1}{V_i} \sum_{r=1}^L \sum_{j=1}^J w_{rj} \mathbf{F}(u(x_{rj}, y_{rj})) \cdot \mathbf{n}_r A_r + \mathcal{O}(h^k)$$

Jusque là, c'est la méthode classique des volumes finis. En effet, on suppose qu'il existe un polynôme p qui approxime la variable d'état u à l'ordre k :

$$p_i(x, y) = u(x, y) + \mathcal{O}(h^k) \quad (x, y) \in S_i$$

Cette distribution polynomiale est discontinue aux frontières des SV. Ainsi l'intégration du flux implique deux variables discontinues de part et d'autres de la frontière d'une SV. Un solveur de Riemann est alors utilisé aux frontières des SV. Jusqu'à présent, la "doctrine" volume fini a été suivie à la lettre. Cependant, rien n'a été précisé quant à la reconstruction polynomiale, c'est-à-dire, comment déterminer les polynômes p_i connaissant uniquement les valeur moyennées \bar{u}_i^{VF} au centre des SV. Dans une méthode volume fini classique, un stencil (un groupe de cellules voisines et la cellule elle-même) est utilisé pour construire l'approximation polynomiale des variables d'état. Au lieu d'utiliser un stencil de cellules voisines, l'originalité de la méthode spectrale décrite ici est de partitionner les SV en sous-cellules appelés volumes de contrôle CV. L'ordre de précision de la reconstruction détermine le nombre de CV dans chaque SV. La différence subtile entre une méthode volume fini classique et la méthode spectrale basée sur une formulation volume fini, c'est que toutes les CV d'une même SV utilisent la même reconstruction polynomiale. Ainsi, il n'est pas nécessaire d'utiliser un solveur de Riemann pour les frontières intérieures entre deux CV, parce que les variables d'état sont continues à travers la frontière entre deux CV. Les flux de Riemann sont nécessaires uniquement à la frontière entre deux SV. Les avantages des schémas spectraux avec formulation volume fini sont les suivants :

- La reconstruction polynomiale est la même pour toutes les SV, ce qui est un atout pour les temps de calcul.
- Les flux à l'intérieur des SV, entre deux CV, est analytique
- Le schéma est compact, ce qui facilite sa parallélisation

3.2.2 Détail de la méthode dans le cas 1D

Conformément au papier de Wang [167], la méthode spectrale à formulation volume fini sera notée méthode SV. On se concentre sur la loi de conservation en 1D :

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(u(x, t))}{\partial x} = 0 \quad \text{sur } [a, b] \times [0, T]$$

L'intervalle $[a, b]$ est divisé en N SV (Spectral Volumes).

$$[a, b] = \bigcup_{i=1}^N S_i \quad S_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$$

On pose $h_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ et $h = \max_{i \leq i \leq N} h_i$. Si k est l'ordre de précision de la méthode, chaque SV est subdivisé en k CV (Control Volumes).

$$S_i = \bigcup_{j=1}^k C_{i,j} = \bigcup_{j=1}^k [x_{i,j-1/2}, x_{i,j+1/2}]$$

avec la convention suivante :

$$\begin{cases} x_{i,1/2} = x_{i-1/2} \\ x_{i,k+1/2} = x_{i+1/2} \end{cases}$$

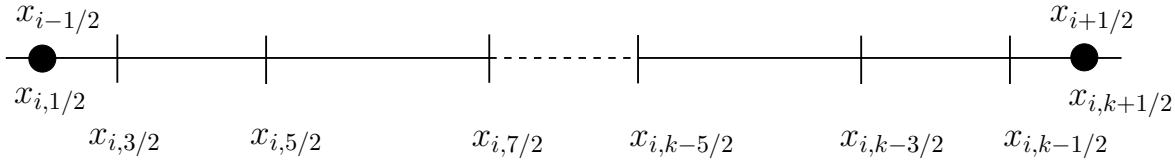


FIGURE 3.4 – Principe de la décomposition du domaine de calcul en SV et CV.

On note $h_{i,j} = x_{i,j+1/2} - x_{i,j-1/2}$. La valeur moyennée de la valeur d'état dans la cellule $C_{i,j}$ est définie par :

$$\bar{u}_{i,j}^{\text{VF}}(t) = \frac{\int_{x_{i,j-1/2}}^{x_{i,j+1/2}} u(x, t) dx}{h_{i,j}}$$

Le problème de la reconstruction dans la méthode SV est le suivant. Connaissant les valeurs moyennées $\bar{u}_{i,j}^{\text{VF}}$ dans chaque $C_{i,j}$ dans S_i , comment construire un polynôme $p_i(x)$ de degré au moins $k - 1$ dans S_i tel qu'il soit une approximation à l'ordre k de la fonction $u(x)$ dans S_i .

$$p_i(x) = u(x) + \mathcal{O}(h^k) \quad x \in S_i \quad i = 1, \dots, N$$

En particulier, cette reconstruction sera valide aux frontières entre deux CV. Le point de départ du raisonnement est relatif aux valeurs moyennées $\bar{u}_{i,j}^{\text{VF}}$ dans chaque $C_{i,j}$ de S_i . A partir uniquement de ces valeurs, on va reconstruire un polynôme d'ordre au moins $k - 1$, et on vérifiera l'ordre de convergence souhaité.

On définit la fonction $U(x)$ ainsi :

$$U(x) = \int_{x_{i,1/2}}^x u(\xi) d\xi \quad x \in S_i$$

On a alors :

$$U(x_{i,j+1/2}) = \sum_{l=1}^j \int_{x_{i,l-1/2}}^{x_{i,l+1/2}} u(\xi) d\xi = \sum_{l=1}^j \bar{u}_{i,l}^{\text{VF}} h_{i,l} \quad j = 1, \dots, k \quad (3.14)$$

Ainsi la primitive est connue de façon exacte aux frontières des CV grâce aux valeurs moyennées des CV (les $\bar{u}_{i,l}^{\text{VF}}$). Alors, (théorème classique d'interpolation), il existe un polynôme unique P_i de degré au moins k qui interpole $U(x_{i,j+1/2})$ aux $k+1$ points $x_{i,1/2}, \dots, x_{i,k+1/2}$. On note également $p_i(x)$ le polynôme dérivé de P_i .

Pour P_i , on utilise le polynôme d'interpolation de lagrange :

$$P_i(x) = \sum_{r=0}^k U_{i,r+1/2} L_{i,r+1/2}(x) \quad x \in S_i \quad (3.15)$$

avec ici

$$\begin{cases} U_{i,r+1/2} = U(x_{i,r+1/2}) \\ L_{i,r+1/2} = \prod_{l=0, l \neq r}^k \frac{x - x_{i,l+1/2}}{x_{i,r+1/2} - x_{i,l+1/2}} \end{cases} \quad (3.16)$$

Ainsi :

$$p_i(x) = P_i'(x) = \sum_{r=1}^k U_{i,r+1/2} L'_{i,r+1/2}(x)$$

En utilisant l'équation (3.14), on a alors :

$$p_i(x) = \sum_{r=1}^k \sum_{l=1}^r \bar{u}_{i,l}^{\text{VF}} h_{i,l} L'_{i,r+1/2}(x) = \sum_{l=1}^k \left(\sum_{r=l}^k h_{i,l} L'_{i,r+1/2}(x) \right) \bar{u}_{i,l}^{\text{VF}} \quad (3.17)$$

Après calculs élémentaires (mais sans mauvaises surprises), on montre que (voir [167] pour une description complète et détaillée du calcul) :

$$\sum_{r=l}^k h_{i,l} L'_{i,r+1/2}(x) = h_{i,l} \sum_{r=l}^k \frac{1}{\omega'(x_{i,r+1/2})} \sum_{m=0, m \neq r}^k \prod_{q=0, q \neq r, m}^k (x - x_{i,q+1/2})$$

et finalement :

$$p_i(x) = \sum_{l=1}^k \left(h_{i,l} \sum_{r=l}^k \frac{1}{\omega'(x_{i,r+1/2})} \sum_{m=0, m \neq r}^k \prod_{q=0, q \neq r, m}^k (x - x_{i,q+1/2}) \right) \bar{u}_{i,l}^{\text{VF}} \quad (3.18)$$

Ainsi, on a exprimé le polynôme p_i en fonction des seules variables moyennées $\bar{u}_{i,l}^{\text{VF}}$. Il nous faut montrer à présent l'ordre d'approximation de la fonction u par le polynôme p_i .

Pour ce faire, on définit la fonction ϕ suivante :

$$\phi(z) = U(z) - P_i(z) - K \prod_{j=1}^{k+1} (z - x_j)$$

On fixe $x \in S_i$ et alors K est défini tel que $\phi(x) = 0$. Alors, la fonction ϕ s'annule en $k + 2$ points (les $k + 1$ points $(x_{i,1/2}, \dots, x_{i,k+1/2})$ et x). Alors, d'après le théorème de Rolle, $\phi'(z)$ s'annule en au moins $k + 1$ points. En réapplican le théorème de Rolle à ϕ' , on montre que ϕ'' s'annule en au moins k points. Et ainsi de suite, jusqu'à $\phi^{(k+1)}$ s'annule au moins en un point ξ de S_i . Le polynôme P_i étant de degré k , sa $(k + 1)^{\text{ème}}$ dérivée est nulle et ainsi :

$$\phi^{(k+1)}(z) = U^{(k+1)}(z) - K(k + 1)!$$

Or $\phi^{(k+1)}(\xi) = 0$ et donc finalement $K = \frac{U^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}$. Comme $\phi(x) = 0$, on a :

$$\begin{aligned} U(x) - P_i(x) &= \frac{U^{(k+1)}(\xi) \prod_{j=1}^{k+1} (x - x_j)}{(k + 1)!} \\ U(x) - P_i(x) &= \mathcal{O}(h^{k+1}) \\ U'(x) - P'_i(x) &= \mathcal{O}(h^k) \\ u(x) - p_i(x) &= \mathcal{O}(h^k) \end{aligned}$$

ce qui démontre l'ordre d'approximation. Cette approximation reste vraie aux frontières entre deux CV :

$$u_{i,j+1/2} \equiv p_i(x_{i,j+1/2}) = u(x_{i,j+1/2}) + \mathcal{O}(h^k)$$

Alors, en utilisant l'équation 3.18, on obtient finalement :

$$u_{i,j+1/2} = \sum_{l=1}^k \left(h_{i,l} \sum_{r=l}^k \frac{1}{\omega'(x_{i,r+1/2})} \sum_{m=0, m \neq r}^k \prod_{q=0, q \neq r, m}^k (x_{i,j+1/2} - x_{i,q+1/2}) \right) \bar{u}_{i,l}^{\text{VF}} + \mathcal{O}(h^k) \quad (3.19)$$

On vient ainsi de reconstruire les variables d'état aux frontières de deux CV en fonction des valeurs moyennes dans chaque CV. On peut alors mettre à jour chaque CV de la façon suivante :

$$\frac{d\bar{u}_{i,j}^{\text{VF}}}{dt} h_{i,j} + (f_{i,j+1/2} - f_{i,j-1/2}) = 0$$

où $f_{i,j+1/2}$ est le flux numérique au point $x_{i,j+1/2}$. Aux frontières de deux CV, la variable d'état reconstruite est continue et le flux analytique peut être directement utilisé :

$$f_{i,j+1/2} = f(u_{i,j+1/2}) \quad \text{pour } j = 1 \dots k - 1$$

A la frontière de deux SV $x_{i-1/2}$ et $x_{i+1/2}$ (ou $x_{i,1/2}$ et $x_{i,k+1/2}$) on trouve deux valeurs reconstruites : une à gauche et l'autre à droite. Pour reconstruire le flux à la frontière entre deux SV, on utilise un solveur de Riemann.

$$\begin{aligned} f_{i,1/2} &= f_{\text{Riemann}}(u_{i-1,k+1/2}, u_{i,1/2}) \\ f_{i,k+1/2} &= f_{\text{Riemann}}(u_{i,k+1/2}, u_{i+1,1/2}) \end{aligned}$$

La méthode générale en 1D vient d'être présentée et chaque valeur $\bar{u}_{i,j}^{\text{VF}}$ peut désormais être mise à jour. Mais le phénomène de Gibbs associé aux schémas d'ordre élevé provoque la perte de monotonicité de la solution. Pour remédier à ce problème, nous utilisons un limiteur d'après l'idée originale de van Leer [157, 158].

Les polynômes interpolés sur une grille constante sont très oscillants. L'utilisation d'une grille de Gauss-Lobatto permet de réduire ces oscillations. Sur l'intervalle $[-1, 1]$, la grille de Gauss-Lobatto est donnée par :

$$x_{i,j+1/2} = -\cos\left(\frac{j\pi}{k}\right)$$

L'extension au cas 2D requiert un polynôme 2D de degré k pour la reconstruction de la variable u . L'espace d'approximation est donc de dimension $N_k = \frac{(m+1)(m+2)}{2}$. Ainsi, chaque SV doit être divisée en N_k CV qui ne se chevauchent pas. Pour les ordres courants d'approximation ($k = 2$ à 5), N_k n'est pas un carré, ce qui nous empêche de conserver un maillage cartésien structuré. De plus, comme le montre Wang dans [169], la méthode SV devient vite très coûteuse en 3D. En effet, pour obtenir des ordres de convergence élevés en 3D, le découpage des SV nécessite un grand nombre de paramètres. L'optimisation de ce découpage devient vite compliquée pour obtenir une convergence de précision spectrale. Le nombre de facettes intérieures augmente vite, ainsi que le nombre de points de quadrature sur chaque facette. C'est pour cela que Wang [85] a développé une méthode similaire mais avec une approche différence finie. Le coût de calcul est largement réduit en utilisant les inconnues nodales elles-mêmes pour la reconstruction. Nous nous proposons maintenant de présenter cette nouvelle approche.

3.3 Schémas spectraux : formulation différences finies

A la base, la méthode spectrale à formulation différences finies (que nous noterons désormais méthode SD) est une méthode spectrale nodale pensée pour les maillages non structurés [85]. Dans la méthode SV, les flux entre deux CV sont calculés à partir d'une interpolation des valeurs moyennées dans chaque CV. Dans la méthode SD, les flux aux frontières entre deux CV sont reconstruits par interpolation des valeurs au centre des CV (au sens de la grille de Gauss). A la frontière entre deux SV, un solveur de Riemann est utilisé. Pour obtenir la dérivée des flux, une reconstruction polynomiale à partir des dérivées des polynômes de Lagrange est utilisée. Une explication détaillée sera fournie par la suite. C'est ainsi que la méthode fait référence aux différences finies.

Nous utilisons dans notre travail la version de la méthode SD dédiée aux maillages 2D structurés. La description est faite par Wang [168] et nous la détaillons à présent. Comme pour la méthode SV, chaque cellule de calcul (appelées encore SV) est divisée en sous-cellules appelées CV. Les solutions x_s sont réparties sur une grille de Gauss, alors que les flux $x_{s+1/2}$ sont répartis sur une grille de Gauss-Lobatto. Si k est l'ordre souhaité, les grilles pour la solution et les flux sont définies ainsi :

$$\begin{cases} x_s = \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(\frac{2s-1}{2k}\pi\right) \right] & s = 1, 2, \dots, k \\ x_{s+1/2} = \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(\frac{s}{k}\pi\right) \right] & s = 0, 1, 2, \dots, k \end{cases}$$

On a des expressions similaires pour la direction y . Le détail des grilles de Gauss et Gauss-Lobatto est représenté sur la figure 3.5. Les grilles présentées représentent une discrétisation de la cellule canonique $[0, 1]$. En pratique, tous les calculs sont effectués dans cette base

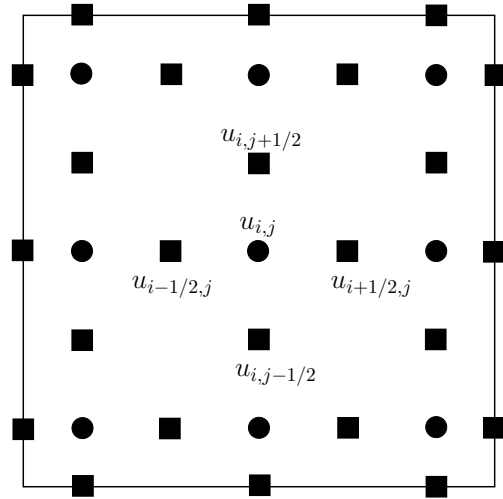


FIGURE 3.5 – Répartition des points (cercles) et des flux (carrés) sur une grille 2D pour la méthode SD.

canonique et les solutions sont ensuite exprimées dans la cellule réelle par changement de la métrique.

On définit alors deux séries de polynômes de Lagrange. Tout d'abord ceux construits à partir des points x_s :

$$h_i(x) = \prod_{s=1, s \neq i}^k \frac{x - x_s}{x_i - x_s} \quad i = 1 \dots k$$

et ceux construits à partir des points où s'expriment les flux :

$$l_{i+1/2}(x) = \prod_{s=0, s \neq i}^k \frac{x - x_{s+1/2}}{x_{i+1/2} - x_{s+1/2}} \quad i = 0 \dots k$$

Alors, la reconstruction de la solution à partir des variables $u_{i,j}$ est donnée par :

$$u(\xi, \eta) = \sum_{l=1}^k \sum_{j=1}^k u_{i,j} h_i(\xi) h_j(\eta)$$

L'algorithme de la méthode SD est le suivant :

- A partir des $u_{i,j}$ et de la formule (3.3), les variables sont interpolées aux points de collocation des flux. On obtient alors $u_{i+1/2,j}$ et $u_{i,j+1/2}$.
- A partir des solutions obtenues à l'étape 1, on construit de façon analytique les flux F et G aux frontières entre deux CV. A la frontière entre deux SV, le flux est construit à partir d'un solveur de Riemann.
- Pour calculer la dérivée des flux, on utilise la dérivée des polynômes de Lagrange comme suit :

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right)_{i,j} = \sum_{r=0}^k F_{r+1/2,j} l'_{r+1/2}(\xi_i)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial \xi} \right)_{i,j} = \sum_{r=0}^k G_{i,r+1/2} l'_{r+1/2}(\eta_j)$$

où F et G désignent les flux.

- L'utilisation des dérivées permet la mise à jour des degrés de liberté :

$$\frac{\partial u_{i,j}}{\partial t} = - \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} + \frac{\partial G}{\partial \xi} \right)_{i,j}$$

Ainsi la méthode SD est une méthode simple à implémenter, et l'extension en 3D est immédiate. La méthode conserve son caractère compact, ce qui en fait un atout majeur pour une utilisation dans un code parallélisé. La méthode SD est sensible au phénomène de Gibbs. Comme pour la version volumes finis, des limiteurs sont nécessaires. Mais nous n'avons pas trouvé d'explications claires dans la littérature quant à l'implantation de ces limiteurs, et ceux que nous avons codés détruisaient fortement l'ordre de convergence. Nous avons choisi de ne pas limiter la méthode SD.

Nous avons présenté dans ce chapitre différentes techniques pour discrétiser les termes spatiaux de l'équation d'advection de ϕ . Ces méthodes sont toutes d'ordre élevé et seront comparés au travers de cas tests typiques dans les chapitres suivants. Il faudra déterminer quel schéma est le plus adéquat en fonction de la physique étudiée.

Dans le chapitre suivant, on se propose de coupler la méthode level-set avec des marqueurs. Cette méthode hybride permet de garder les bonnes propriétés géométriques offertes par ϕ et de pallier aux pertes de masses. L'utilisation de marqueurs permet également d'améliorer sensiblement le calcul de la courbure.

Chapitre 4

Méthode hybride de capture d'interface : couplage level-set/particules

Sommaire

4.1	Présentation de la méthode	62
4.2	L'interpolation cubique par spline	63
4.3	Fragmentation et coalescence de l'interface	66
4.4	Reconstruction de l'interface	67
4.4.1	Reconstruction à partir de la distance euclidienne	67
4.4.2	La méthode de fast marching	69
4.4.3	Performance de la méthode fast marching en terme de CPU	72
4.5	Le calcul de la courbure	72

Les chapitres précédents ont présenté les méthodes classiques de suivi d'interface. Qu'elles soient lagrangiennes ou eulériennes, elles ont toutes leurs avantages et inconvénients. L'idée de combiner plusieurs méthodes complémentaires de suivi d'interface permet de pallier les inconvénients de chaque méthode utilisée seule. C'est en suivant cette idée que Sussmann *et al.* [141, 142] a combiné l'utilisation de la level-set avec du VOF pour garantir la conservation de la masse tout en garantissant les bonnes propriétés géométriques de la level-set. Malheureusement, les méthodes level-set et VOF sont toutes deux des méthodes eulériennes et ne parviennent pas à gagner en précision lorsque la configuration présente un coin (qui est inévitablement lissé). La première technique de couplage lagrangien/eulérien est proposée par Enright *et al.* [35] via la méthode PLS (Particle Level-Set) où la fonction level-set est corrigée par des particules sans masse placées à la fois à l'intérieur et l'extérieur de l'interface et qui sont advectées avec l'interface. Les régions à forte courbure sont résolues avec un ordre élevé et les pertes de masses sont corrigées. Ainsi, les particules offrent une sur-résolution dans des régions où le maillage eulérien est trop lâche pour capturer les plus petites échelles interfaciales. La technique PLS a été améliorée par Losasso *et al.* par l'utilisation de techniques adaptatives. Hieber et Koumoutsakos [52] proposent une méthode PLS lagrangienne où les particules sont placées dans un tube autour de l'interface.

D'autres techniques concernent les méthodes level-set couplées avec des marqueurs posi-

tionnés non plus au voisinage de l'interface, mais le long de l'interface. L'isocontour 0 de la level-set est alors corrigé par les marqueurs. La level-set est utilisée pour la détection automatique des changements topologiques alors que les marqueurs sont utiles dans les régions de forte courbure. De plus, l'utilisation de particules placés le long de l'interface permet le transport tangentiel de l'information. Dans la méthode MLS (Marker Level-Set) de Mihalef *et al.* [98], les marqueurs sont utilisés pour corriger la level-set. Mais Mihalef [98] ne propose pas de couplage avec l'équation de moment, et la précision sous-maille offerte par les marqueurs n'est pas utilisée dans le calcul de la courbure. Leung *et al.* [74] représentent l'interface par des particules sans masse où chaque particule est associée à une cellule voisine du maillage eulérien. Dans les régions de forte courbure, la cellule eulérienne correspondante est raffinée et de nouvelles particules sont ajoutées sur l'interface et associées aux nouvelles cellules eulériennes créées. Cette méthode est quelque peu coûteuse car elle nécessite un raffinement local de la grille eulérienne. Li [77] a développé une méthode particules/level-set pour la simulation d'écoulements turbulents. Des particules sont réparties le long de l'interface et la méthode de capture d'interface est couplée à l'équation de moment. La méthode s'avère très précise pour capturer les filaments et les structures fines dans le cas turbulent. Mais dans [77], la correction de la level-set par les marqueurs est basée sur une approximation du vecteur tangent à l'interface, ce qui peut s'avérer insuffisant dans les zones de forte courbure.

Nous avons développé une méthode particules/level-set couplée à l'équation de moment. Notre méthode s'avère très performante pour le calcul de la courbure, ce qui améliore sensiblement le traitement des sauts à l'interface. Dans un premier temps, ce chapitre sera consacré à la présentation de la méthode level-set/particules que nous avons développée. Le couplage de cette méthode avec le solveur Navier-Stokes sera présenté plus tard et comparé à d'autres techniques.

4.1 Présentation de la méthode

L'interface est représentée par une liste doublement chaînée de particules. Chaque nœud de cette liste représente une particule reliée à ses voisins amont et aval. Un exemple de la configuration est proposé sur la figure 4.1 Le fait d'utiliser une liste doublement chaînée est très utile pour ajouter ou enlever une particule de la liste. Et ceci permet de calculer des paramètres géométriques comme la normale à l'interface de façon aisée, contrairement à une représentation où il n'y a pas de connectivité pour les particules. Les particules sont advectées simplement de façon lagrangienne :

$$\mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{X}^n + \mathbf{V}^n \cdot \Delta t$$

où \mathbf{X}^n est la position de la particule au temps t_n , \mathbf{V}^n la vitesse de la particule et Δt le pas de temps. La vitesse de la particule est obtenue à partir de la grille eulérienne sous-jacente grâce à une interpolation bicubique du champ de vitesse eulérien. Il s'est avéré que l'interpolation bilinéaire n'était pas suffisante.

Pour maintenir une description précise de l'interface, une opération de réensemencement (reseeding) est nécessaire. Cette opération consiste à supprimer des particules dans des zones où une accumulation de marqueurs a eu lieu. Au contraire, les zones pauvres en particules doivent être enrichies en marqueurs. Le procédé de reseeding a été brièvement décrit dans la partie 2.1 de ce manuscrit. La technique utilisée pour l'ajout et la suppression de particules est une interpolation cubique par splines [166].

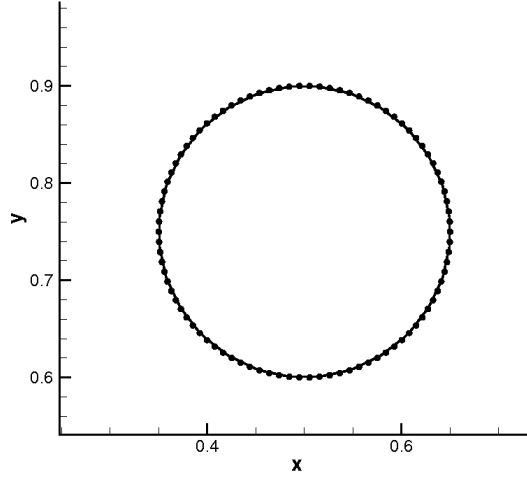


FIGURE 4.1 – Configuration de l'interface représentée par l'iso- $\phi = 0$ (ligne continue) et les particules (symboles).

Un nombre de 3 particules par cellule a été retenu pour décrire l'interface. Cependant, ce nombre est insuffisant dans les zones de forte courbure et, avec 3 particules par maille, l'interface peut être localement sous-résolue. Une mauvaise reconstruction de la level-set à partir des marqueurs en découle alors. C'est pourquoi nous avons mis en place une procédure de reseeding supplémentaire basée sur la courbure. Seules les zones de forte courbure voient leur concentration en particules augmenter localement. La figure 4.2 représente le principe de reseeding basé sur la courbure. Deux zones de forte courbure apparaissent ici : à la tête et à la queue du serpent.

4.2 L'interpolation cubique par spline

Nous détaillons dans cette partie le principe de l'interpolation cubique par spline. Cette interpolation est utilisée dans les procédures de reseeding, dans le calcul de la courbure et dans le processus d'initialisation de la level-set à partir des marqueurs.

Considérons deux particules sur l'interface dont les abscisses curvilignes sont notées respectivement s_i et s_{i+1} et dont les vecteurs coordonnées sont respectivement donnés par $\mathbf{X}_i \equiv \mathbf{X}_i(s_i)$ et $\mathbf{X}_{i+1} \equiv \mathbf{X}_{i+1}(s_{i+1})$. Si $s \in [s_i; s_{i+1}]$, l'interpolation cubique par spline pour $\mathbf{X}(s)$ est donnée par :

$$\mathbf{X}(s) = A(s_i, s_{i+1}, s)\mathbf{X}_i + B(s_i, s_{i+1}, s)\mathbf{X}_{i+1} + C(s_i, s_{i+1}, s)\mathbf{X}_i'' + D(s_i, s_{i+1}, s)\mathbf{X}_{i+1}'' \quad (4.1)$$

où $\mathbf{X}_i'' \equiv \mathbf{X}_i''(s_i) = \frac{d^2\mathbf{X}}{ds^2}(s_i)$ et $\mathbf{X}_{i+1}'' \equiv \mathbf{X}_{i+1}''(s_{i+1}) = \frac{d^2\mathbf{X}}{ds^2}(s_{i+1})$. Pour obtenir $\mathbf{X}(s)$ (Eq. (4.1)), \mathbf{X}_i'' et \mathbf{X}_{i+1}'' doivent être connus. L'idée principale de la spline cubique est de forcer la continuité des dérivées premières $\frac{d\mathbf{X}}{ds}(s)$ en s_i et s_{i+1} et d'utiliser cette continuité pour écrire les équations pour les dérivées secondes \mathbf{X}_i'' . La dérivée $\frac{d\mathbf{X}}{ds}(s)$ évaluée pour $s = s_i$ dans

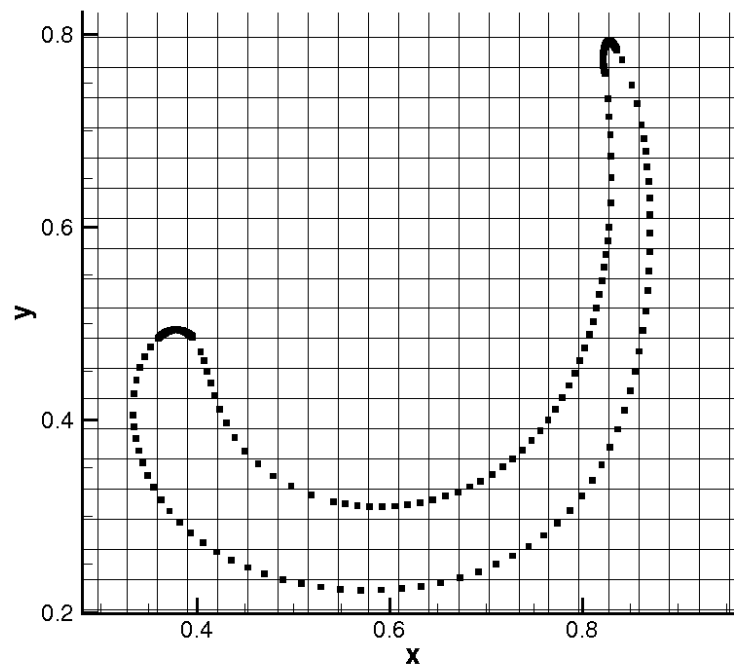


FIGURE 4.2 – Procédure de re seeding basé sur la courbure locale. Les marqueurs sont représentés par des carrés noirs. Pour les fortes courbures, des particules sont ajoutées (ici à la tête et à la queue du serpent).

l'intervalle $[[s_{i-1}; s_i]]$ est imposée égale à la dérivée évaluée pour $s = s_i$ mais dans l'intervalle $[[s_i; s_{i+1}]]$. Finalement, si $\mathbf{X}_i(s_i) = (x_i(s_i), y_i(s_i)) = (x_i, y_i)$, alors le système d'équations à résoudre est :

$$\begin{cases} \frac{s_j - s_{j-1}}{6} x''_{j-1} + \frac{s_{j+1} - s_{j-1}}{3} x''_j + \frac{s_{j+1} - s_j}{6} x''_{j+1} = \frac{x_{j+1} - x_j}{s_{j+1} - s_j} - \frac{x_j - x_{j-1}}{s_j - s_{j-1}} \\ \frac{s_j - s_{j-1}}{6} y''_{j-1} + \frac{s_{j+1} - s_{j-1}}{3} y''_j + \frac{s_{j+1} - s_j}{6} y''_{j+1} = \frac{y_{j+1} - y_j}{s_{j+1} - s_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{s_j - s_{j-1}} \end{cases} \quad (4.2)$$

Ainsi, il y a $N - 2$ équations pour N inconnues (les \mathbf{X}_j''). Pour obtenir une solution unique, deux conditions sont spécifiées en s_1 et s_N . Dans le cas d'une interface fermée qui n'a pas d'interaction avec les conditions limites, on impose $\mathbf{X}_1'' = \mathbf{X}_N''$. Ainsi, le jeu d'équations à résoudre est un système tridiagonal cyclique. En revanche, si l'interface intersecte les conditions limites, \mathbf{X}_1'' et \mathbf{X}_N'' sont fixées de telle sorte à imposer la valeur de la dérivée première sur la condition limite. Ceci revient à imposer un angle de contact entre l'interface et la paroi de la boîte de calcul. Et finalement l'interpolation cubique par spline pour $\mathbf{X}(s)$ est déterminée grâce à l'équation (4.1). Une configuration de l'interpolation cubique par spline est représentée sur la figure 4.3(a) Sur cette figure, l'interface est représentée par l'iso- $\phi = 0$

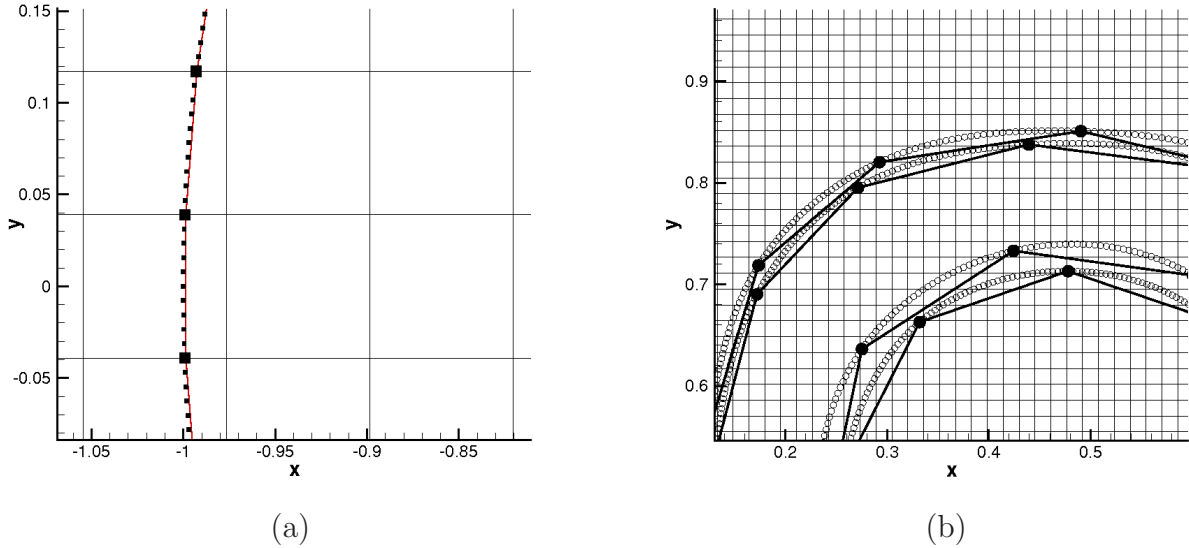


FIGURE 4.3 – (a) : Interpolation cubique par splines. Ligne continue rouge : iso- $\phi = 0$. Gros carrés noirs : Particules initiales sur l'interface. Petits carrés noirs : nouvelles particules ajoutées après interpolation par spline. (b) : L'interpolation cubique par splines : une interpolation régulière. Gros carrés noirs : particules initiales sur l'interface. Petits cercles noirs : nouvelles particules ajoutées après interpolation par splines. Ligne continue : Interpolation linéaire entre deux particules (deux gros cercles noirs)

(en rouge) et les gros carrés noirs sont les marqueurs lagrangiens initialement répartis sur l'interface. Les petits carrés noirs sont les marqueurs rajoutés sur l'interface à partir des gros carrés noirs après une interpolation par splines. Comme on le voit sur la figure, l'interpolation cubique par splines est une interpolation très régulière. La figure 4.3(b) compare

l'interpolation par spline avec l'interpolation linéaire. Les gros cercles sont les marqueurs initiaux répartis sur l'interface. Les petits cercles sont le résultat d'une interpolation par spline. L'interface reconstruite par splines est beaucoup plus lisse que l'interpolation linéaire (qui joint directement les gros cercles). Cette régularité sera exploitée pour le calcul de la courbure qui sera nettement améliorée. On pourrait croire que l'excès de régularité de la méthode par spline a tendance à "engraisser" l'interface, provoquant ainsi un gain de masse. En fait, il n'en est rien comme le montreront les bilans de masse effectués sur les cas tests de base.

4.3 Fragmentation et coalescence de l'interface

Comme expliqué dans les chapitres précédents, une des difficultés majeures pour les méthodes de front-tracking est le changement topologique de l'interface. Un critère est requis pour forcer l'interface à se fragmenter et à coalescer. Dans notre travail, le critère retenu est très simple. C'est la distance entre deux marqueurs non consécutifs qui détermine si le changement topologique de l'interface doit avoir lieu. Par exemple, lorsque deux particules non consécutives sont suffisamment proches l'une de l'autre, l'interface est cassée au niveau de ces marqueurs en deux morceaux d'interface. Une configuration où l'interface se casse en deux est représentée sur la figure 4.4. Sur la figure de gauche (a), les deux marqueurs

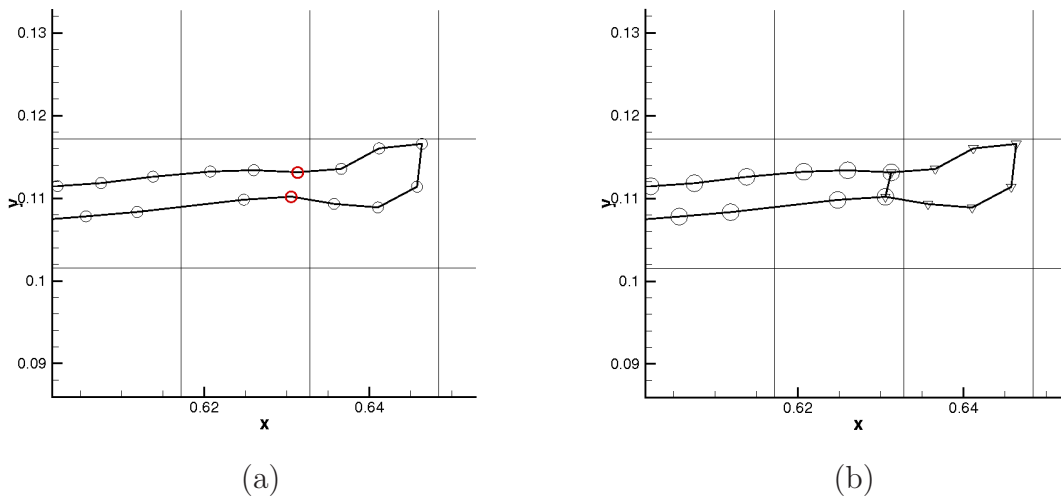


FIGURE 4.4 – Fragmentation de l'interface. (a) : avant la fragmentation de l'interface. Les marqueurs sont représentés par les cercles noirs. Les deux particules rouges sont suffisamment proches pour provoquer une cassure de l'interface à cet endroit. (b) : après la fragmentation de l'interface. Deux morceaux de l'interface sont représentés. Le premier morceau par des cercles noirs, le deuxième par des triangles noirs.

en rouge sont deux points non consécutifs de l'interface et leur distance l'un à l'autre est inférieure au critère fixé de rupture de l'interface. Une cassure se produit au niveau de ces marqueurs. Pour comprendre comment se produit cette cassure, on note I l'interface initiale qui se casse en deux interfaces I_1 et I_2 . Le point de contact de I_1 et I_2 se fait au niveau des

deux marqueurs rouges que l'on appelle P_A et P_B . Alors, deux nouveaux marqueurs $P_{A'}$ et $P_{B'}$ sont créés et confondus respectivement avec P_A et P_B . La correspondance est géométrique et non pas connectique. En effet, les points $P_{A'}$ et $P_{B'}$ ne sont pas connectés à P_A et P_B . Ainsi, P_A et P_B restent sur I_1 et $P_{A'}$ et $P_{B'}$ sont sur I_2 . Ce principe est illustré sur la figure (b) de 4.4 où I_1 est représentée par les marqueurs circulaires alors que I_2 est représentée par les marqueurs triangulaires. Ce procédé assure la conservation de la masse lors de la fragmentation de l'interface. La technique est similaire pour le phénomène de coalescence.

4.4 Reconstruction de l'interface

Les marqueurs seuls pourraient suffire à décrire l'interface. En effet, de nombreuses techniques ont été développées pour calculer la normale à l'interface et la force de tension de surface et ainsi coupler la méthode front-tracking au solveur Navier-Stokes. La connectivité des marqueurs autorise un calcul très précis de la courbure, et la précision sous-maille offerte par l'utilisation de marqueurs confère aux méthode de front-tracking un attrait tout particulier lorsque l'interface est largement déformée avec des petites structures de l'ordre de la maille. Cependant, lorsque les effets de tension de surface sont traités par la méthode ghost-fluid (voir les chapitres suivants pour une description détaillée de cette méthode), une fonction distance est nécessaire pour extrapoler les champs à partir de la grille eulérienne vers l'interface. D'où l'idée naturelle d'utiliser la représentation précise de l'interface par les marqueurs pour reconstruire une fonction distance signée (une fonction level-set). Ainsi, les techniques très efficaces développées pour le solveur Navier-Stokes et basées sur l'existence d'une fonction level-set restent encore utilisables, et ceci même en utilisant une méthode de suivi d'interface différente, ici une méthode hybride level-set/particules.

Les deux techniques utilisées dans notre travail pour reconstruire la level-set à partir des marqueurs sont les suivantes : reconstruction à partir de la distance euclidienne classique (méthode naïve). On a aussi développé une méthode de fast marching qui s'avère rapide. Nous nous proposons de détailler ces deux techniques dans les sections suivantes.

4.4.1 Reconstruction à partir de la distance euclidienne

Si \mathbf{x} est un point de la grille eulérienne, sa distance à l'interface $|\phi|$ est donnée par

$$|\phi| = \min_{\mathbf{x}_p \in \mathcal{P}} d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_p)$$

où \mathcal{P} est l'ensemble des marqueurs qui décrivent l'interface et $d(\cdot, \cdot)$ la distance euclidienne classique. Cette méthode peut souffrir d'un manque de précision si le nombre de particules par cellule est trop faible. Li [77] améliore la façon de calculer $|\phi_{ij}|$ au point (i, j) . Si \mathbf{X}_p est la particule sur l'interface la plus proche de (i, j) , Li considère \mathbf{X}_{p-1} et \mathbf{X}_{p+1} les particules de l'interface avant et après \mathbf{X}_p . Alors, le vecteur tangent à l'interface $\boldsymbol{\tau}$ en \mathbf{X}_p est calculé de la façon suivante : $\boldsymbol{\tau} \approx (\mathbf{X}_{p+1} - \mathbf{X}_{p-1}) / |\mathbf{X}_{p+1} - \mathbf{X}_{p-1}|$. $|\phi_{ij}|$ est alors donnée par la distance entre le nœud (i, j) et la projection de (i, j) sur $\boldsymbol{\tau}$. Cette technique manque de précision dans le calcul de $\boldsymbol{\tau}$ pour des configurations où la courbure est forte et où la tangente à l'interface varie très vite d'un point à l'autre. Trois particules par maille n'est pas suffisant alors pour un calcul précis de $\boldsymbol{\tau}$ dans ces cas là. L'idée est alors de rajouter localement des particules par une interpolation cubique par spline. Encore une fois, cette interpolation reste

locale. Voici le principe. Soit $\mathbf{x}_{i,j}$ un point de la grille eulérienne pour lequel on veut calculer la fonction $|\phi_{ij}|$. Soit alors \mathbf{X}_p le marqueur situé sur l'interface le plus proche de $\mathbf{x}_{i,j}$. Si \mathbf{X}_{p-1} et \mathbf{X}_{p+1} sont les particules situées juste avant et juste après \mathbf{X}_p sur l'interface, alors une interpolation par spline est faite entre \mathbf{X}_{p-1} et \mathbf{X}_{p+1} pour augmenter significativement le nombre de particules autour de \mathbf{X}_p sans toutefois augmenter globalement le nombre de particules sur toute l'interface. La configuration est représentée sur la figure 4.5. Ainsi, la

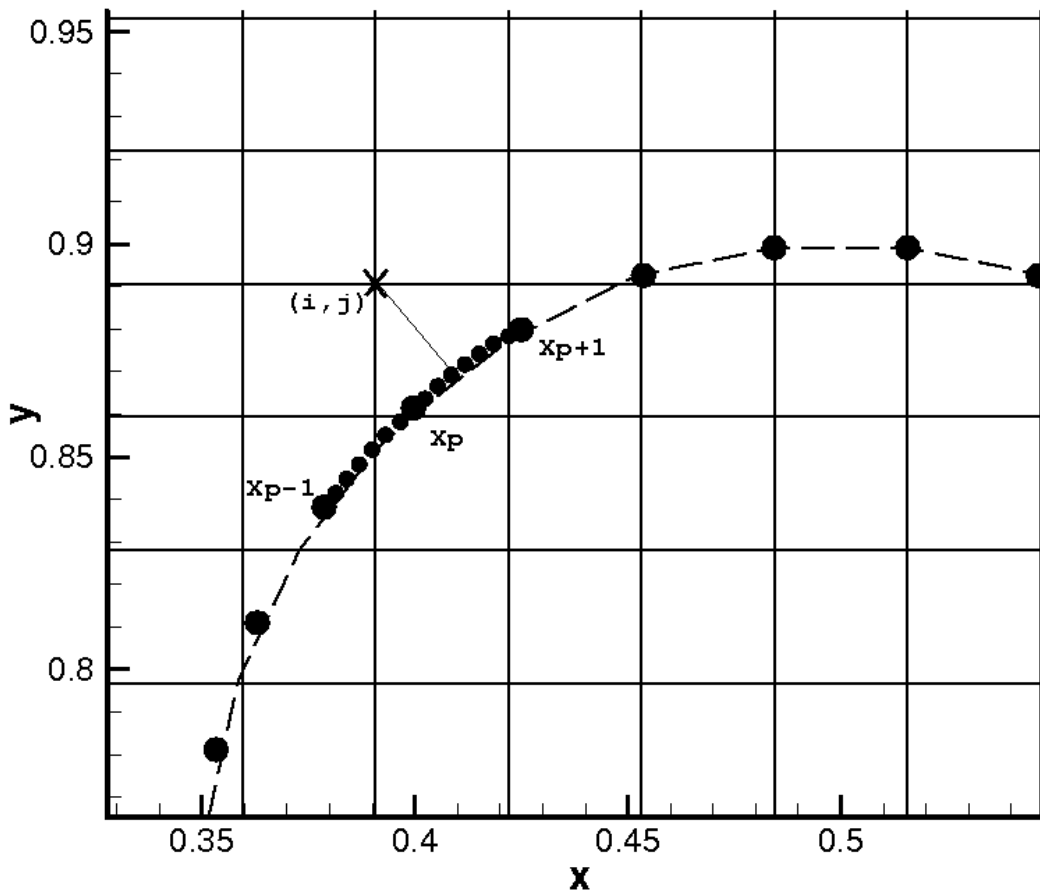


FIGURE 4.5 – Augmentation du nombre de particules autour de \mathbf{X}_p , le marqueur le plus proche du nœud (i, j) sur l'interface. Les coordonnées des nouvelles particules ajoutées sont calculées en utilisant une interpolation cubique par spline.

résolution de l'interface est augmentée localement autour de \mathbf{X}_p . Puis $|\phi_{ij}|$ est donné par la formule (4.4.1) en considérant toutes les particules ajoutées entre \mathbf{X}_{p-1} et \mathbf{X}_{p+1} . A noter que les particules rajoutées pour le calcul de $|\phi_{ij}|$ sont ensuite retirées de l'interface pour éviter une surrésolution néfaste pour le temps de calcul.

Une autre difficulté reste la détermination du signe de ϕ_{ij} . Dans [77], Li utilise également

des marqueurs pour reconstruire une fonction distance. Il suppose que le signe de ϕ_{ij} reste constant durant la phase de réinitialisation par les particules. Ce principe est simple à implanter, mais dramatique dans les zones où l'interface est très fine avec de fortes courbures. En effet, garder le signe de ϕ constant revient à interdire à l'interface de traverser une maille et signifie que la correction de la level-set par les particules est inférieure à une taille de maille. Ceci conduit irrémédiablement à des erreurs sur le signe de ϕ après correction par les marqueurs dans les zones de fortes courbures sous-résolues. Mihalef [98] appelle ce phénomène l'effet "hanging" : la distance est correcte, mais le signe est faux, et l'interface présente des formes en crochets. Pour éviter ces erreurs de "hanging", le signe de ϕ est déterminé uniquement à partir des marqueurs et de leur connectivité. La connectivité permet en effet de déterminer de façon unique si un point extérieur à l'interface est dans la phase $\phi < 0$ ou $\phi > 0$ (grâce à la normale notamment).

Au final, la technique de reconstruction à partir de la distance classique euclidienne est très précise (si le nombre de marqueurs est augmenté localement par une interpolation pour le calcul de la distance) pour mettre à jour la fonction level-set, mais reste globalement très coûteuse.

4.4.2 La méthode de fast marching

A partir des marqueurs sans masse, c'est le problème suivant qui doit être résolu pour reconstruire l'interface :

$$\begin{cases} |\nabla\phi| = 1 \\ \phi = 0 \end{cases} \quad \text{sur } \Gamma \quad (4.3)$$

où Γ est l'interface. L'équation (4.3) est une équation eikonale. La discrétisation numérique de l'équation (4.3) selon un schéma aux différences finies upwind aboutit à :

$$\left[\max(D_{ijk}^{-x}\phi, -D_{ijk}^{+x}\phi, 0)^2 + \max(D_{ijk}^{-y}\phi, -D_{ijk}^{+y}\phi, 0)^2 + \max(D_{ijk}^{-z}\phi, -D_{ijk}^{+z}\phi, 0)^2 \right]^{1/2} = 1 \quad (4.4)$$

où $D_{ijk}^{-x}\phi = \frac{\phi_{ijk} - \phi_{i-1jk}}{\Delta x}$ et $D_{ijk}^{+x}\phi = \frac{\phi_{i+1jk} - \phi_{ijk}}{\Delta x}$. Les définitions sont similaires pour $D_{ijk}^{-y}\phi$, $D_{ijk}^{+y}\phi$, $D_{ijk}^{-z}\phi$ et $D_{ijk}^{+z}\phi$.

La méthode de fast marching, introduite par Sethian [126], repose sur le principe de Huygens. L'interface émet des fronts d'onde circulaires à partir de chacun de ses points. L'enveloppe de ces fronts d'onde met à jour la level-set de chacun des points du maillage eulérien plus éloignés de l'interface en les atteignant les uns après les autres en fonction de leur proximité à l'interface. Ainsi, avec une méthode de fast marching, chaque point du maillage n'est atteint qu'une seule fois, contrairement à la méthode de redistanciation où les caractéristiques peuvent se croiser (voir 2.2.2). Nous exposons ici la méthode de fast marching telle qu'elle est présentée par Sethian [128, 127].

Le point de départ de la méthode fast marching est une série de points sur la grille eulérienne où la solution de l'équation eikonale (4.3) est connue à un instant donné. Ces points sont dans l'état *Accepté*. Pour tout point de la grille eulérienne qui n'est pas encore dans l'état *Accepté* et qui est dans le voisinage d'un point dont l'état est *Accepté*, l'équation (4.4) est résolue (solution d'essai) en utilisant les valeurs de ϕ aux points dont l'état est *Accepté* et la valeur $+\infty$ pour tous les autres points. La solution d'essai est obtenue en suivant l'algorithme proposé par Adelsteinsson [1]. Parmi toutes les solutions d'essai qui sont

Chapitre 4. Méthode hybride de capture d'interface : couplage level-set/particules

calculées, la plus petite d'entre elles est correcte puisqu'elle dépend uniquement de points *Accepté* dont les valeurs de ϕ sont elles-mêmes plus petites. Nous présentons maintenant l'algorithme proposé par Adelsteinsson [1] et qui est suivi dans notre travail pour la méthode fast marching.

Mettre chacun des points de la grille eulérienne dans un des trois états suivants : *Loin* , *Proche* et *Accepté* . Les points de la condition initiale sont marqués *Accepté* . Puis, tous les points situés une maille plus loin d'un point *Accepté* sont marqués comme *Proche* . Finalement, tous les autres points sont marqués comme *Loin* .

Début de la boucle :

1. Le point dans l'état *Proche* qui a la plus petite valeur pour ϕ passe à l'état *Essai* .
2. Tous les voisins de *Essai* qui sont dans l'état *Loin* passent à l'état *Proche* .
3. Pour tous les voisins de *Essai* qui sont dans l'état *Proche* , les valeurs de ϕ sont recalculées d'après l'équation (4.4), en considérant que tous les points dans l'état *Loin* ou *Proche* ont $\phi = +\infty$.
4. Le point dans l'état *Essai* passe à l'état *Accepté* .

Fin de la boucle

En examinant l'algorithme précédent, deux points-clés apparaissent :

- La recherche du minimum pour ϕ parmi les points qui sont dans l'état *Proche* pour trouver le point *Essai*
- La condition initiale

On identifie à présent ces deux points.

Recherche du minimum pour ϕ parmi les points dans l'état *Proche*

Un effort tout particulier doit être mené pour la méthode de recherche de minimum parmi les ϕ des points dont l'état est *Proche* . En effet, le nombre de points dans l'état *Proche* peut devenir très important et l'algorithme de recherche du minimum est appelé à chaque fois qu'un nouveau point de la grille eulérienne est mis à jour. Nous avons utilisé des arbres binaires red-black pour coder l'algorithme de tri. Ces arbres sont issus des B-arbres binaires symétriques inventés par Bayer [10]. Ces arbres ont deux branches (d'où arbre binaire) qui connectent chaque nœud à deux enfants. Ainsi, chaque point dans l'état *Proche* est ajouté dans l'arbre red-black en respectant des règles précises. (voir [164] pour une description détaillée des arbres red-black). Pour chaque point ajouté dans l'arbre, ce dernier reste bien équilibré ce qui assure une efficacité maximale pour la recherche du minimum pour ϕ parmi les points rangés dans l'arbre.

La condition initiale pour la méthode fast marching

La condition initiale reste certainement un aspect des plus délicats à régler. Car de sa qualité et sa précision dépend le reste de la méthode fast marching et donc la mise à jour de toute la level-set. Ce sont les marqueurs qui décrivent l'interface qui vont servir à l'initialisation de la fast marching. Une bande autour de l'interface est initialisée à partir des marqueurs lagrangiens. Cette bande est représentée sur la figure 4.6. Sur cette figure, le maillage est centré sur les points de collocation pour ϕ . Soit \mathbf{X}_p les coordonnées d'une

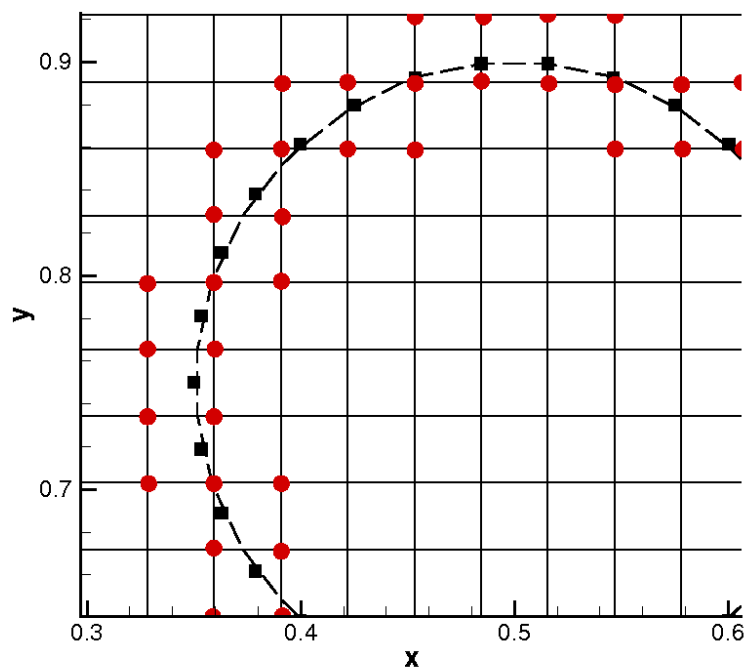


FIGURE 4.6 – Phase d'initialisation de la méthode fast marching. Ligne discontinue : interface ($\phi = 0$). Carrés noirs : particules lagrangiennes sur l'interface. Cercles rouges : points de la grille eulérienne dont la level-set ϕ est initialisée par les particules.

particule de l'interface et soit $\mathbf{x}_{i,j}$ les coordonnées d'un point (i, j) de la grille eulérienne. Alors, on peut trouver i et j tels que \mathbf{X}_p soit à l'intérieur du carré de sommets $\mathbf{x}_{i,j}$, $\mathbf{x}_{i+1,j}$, $\mathbf{x}_{i,j+1}$ et $\mathbf{x}_{i+1,j+1}$. Alors, ces quatre points $\mathbf{x}_{i,j}$, $\mathbf{x}_{i+1,j}$, $\mathbf{x}_{i,j+1}$ et $\mathbf{x}_{i+1,j+1}$ sont passées à l'état *Accepté* et leurs valeurs pour ϕ sont initialisées à partir des marqueurs sur l'interface. Pour déterminer la valeur de $|\phi_{ij}|$ précisément, la technique présentée dans la section précédente 4.4.1 est utilisée, à savoir une augmentation locale des marqueurs par interpolation par spline puis utilisation de la distance classique euclidienne. Cette procédure est réalisée pour chaque marqueur de l'interface. Finalement, une bande est initialisée autour de l'interface (représentée par les marqueurs rouge sur la figure 4.6), ce qui permet d'enclencher la méthode de fast marching.

4.4.3 Performance de la méthode fast marching en terme de CPU

Sur la figure 4.7, on a représenté le temps (en secondes) pris pour la reconstruction de la level-set pour un pas de temps. La méthode par la distance euclidienne classique est comparée à la méthode fast marching. Pour la fast marching, seul le temps de propagation est mesuré et la procédure d'initialisation n'est pas prise en compte. La configuration retenue pour faire ce test est une boîte cubique avec une interface plane au milieu de la hauteur. On reconstruit la level-set dans tout le domaine de calcul à partir de marqueurs uniformément répartis sur l'interface. Deux cas sont étudiés : 3 particules et 10 particules par cellule. Les résultats sont donnés sur la figure 4.7 où différentes résolutions de grille sont présentées (de 16^2 à 256^2). Globalement, le temps de propagation pour la méthode fast marching est plus petit que celui pour la distance euclidienne classique. Le temps pour la méthode fast marching ne dépend pas du nombre de particules. En effet, l'augmentation du nombre de particules aura pour effet d'améliorer la précision quant à l'initialisation de ϕ autour de l'interface. Mais l'étape de propagation en elle-même ne dépend plus des particules, ceci étant dû à l'aspect upwind de la méthode fast marching. Lorsque $N_p = 10$, le temps pris pour la méthode avec distance euclidienne classique est dix fois plus grand que celui avec la méthode fast marching. Ainsi la méthode fast marching est plus rapide que la distance euclidienne. Cependant, cette efficacité peut être fortement altérée par l'initialisation de la fast marching. En effet, la détermination de ϕ dans une bande initiale autour de l'interface doit être très précise, et ce degré de précision peut augmenter considérablement le temps de calcul pour la méthode fast marching globale. De plus, la méthode fast marching telle qu'elle a été codée ici est au premier ordre (cf Eq. (4.4)), contrairement à la méthode de distance euclidienne classique qui est exacte (surtout quand N_p augmente). Ainsi, la méthode finalement retenue pour la reconstruction de ϕ est un compromis entre rapidité et précision. Ce compromis dépend du cas test étudié.

4.5 Le calcul de la courbure

Dans une approche eulérienne, l'utilisation d'une fonction level-set ϕ permet le calcul de la courbure κ :

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \right) \quad (4.5)$$

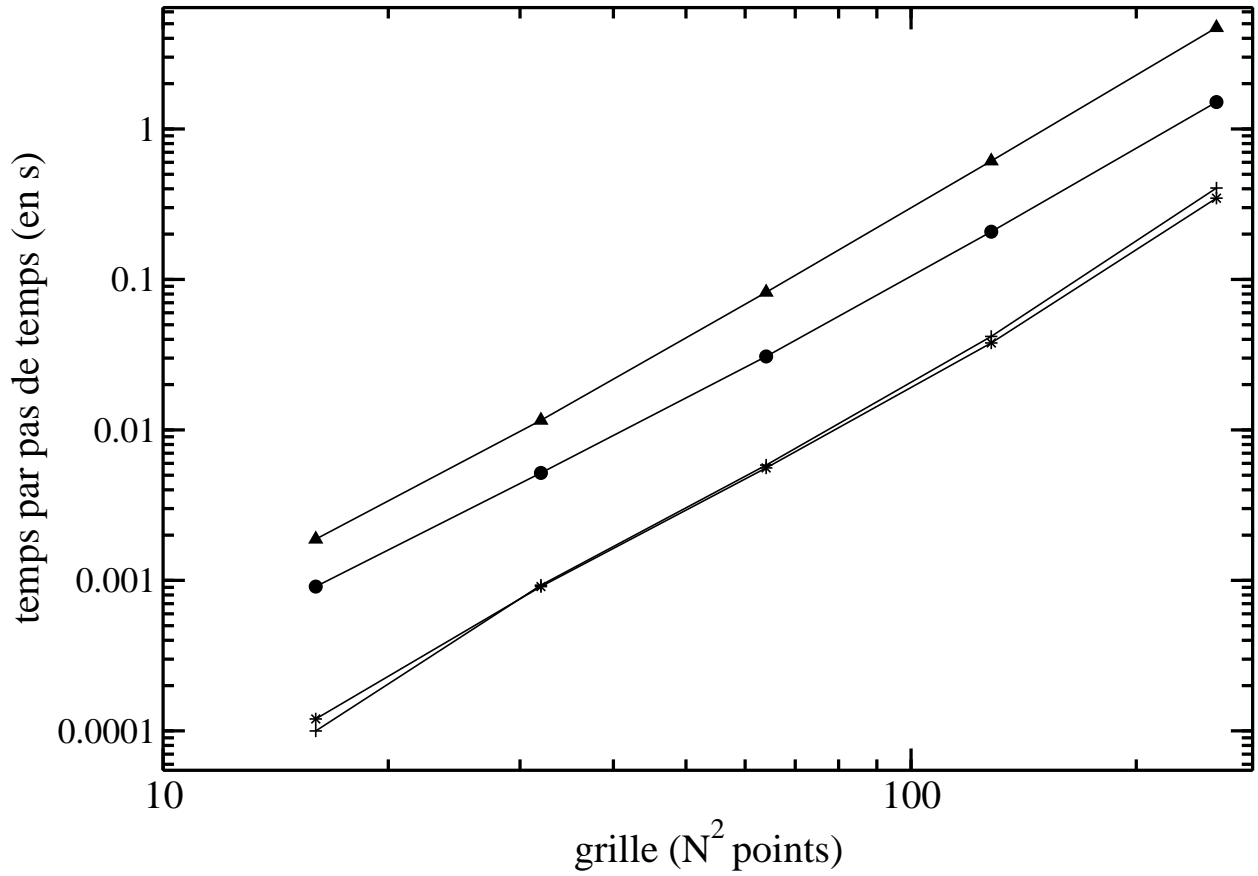


FIGURE 4.7 – Temps en secondes pour la reconstruction de la level-set. Comparaisons entre la distance euclidienne classique et la méthode fast marching sur un pas de temps. (●) : distance euclidienne classique, $N_p = 3$. (▲) : distance euclidienne classique, $N_p = 10$. (+) : méthode fast marching, $N_p = 3$. (*) : méthode fast marching, $N_p = 10$. N_p représente le nombre de particules par cellule.

avec une discrétisation standard au second ordre. Avec la formule (4.5), la courbure κ est évaluée au centre des mailles (i, j) . En général, l'interface ne passe pas exactement au centre de ces mailles et donc, une extrapolation est nécessaire pour exprimer la courbure sur l'interface. C'est la level-set qui permet de réaliser cette extrapolation.

D'un point de vue lagrangien, la courbure peut être connue localement sur l'interface grâce aux marqueurs. L'interpolation par spline fournit pour chaque marqueur une estimation de la courbure locale. En effet, les inconnues principales de l'équation (4.2) sont les vecteurs dérivées secondes $\mathbf{X}_j'' = (x_j''(s_j), y_j''(s_j))$, et une fois cette équation résolue, la courbure est obtenue directement par :

$$\kappa_j = \sqrt{x_j''^2 + y_j''^2} \quad (4.6)$$

où κ_j désigne la courbure à la position \mathbf{X}_j . Ici, aucune extrapolation est nécessaire, ce qui augmente l'ordre de précision de la méthode.

Les deux techniques précédentes représentées par les équation (4.5) et (4.6) sont comparées sur un exemple. Dans une boîte carrée $[-1; 1]^2$, la level-set suivante est initialisée :

$$\phi(x, y) = y - f(x) \quad (4.7)$$

avec f une fonction numérique définie par :

$$\begin{cases} f(x) = -x \cdot \sin\left(\frac{3\pi}{2} x^2\right), & -1 < x \leq -\frac{1}{3} \\ f(x) = \frac{\sqrt{3}}{9} |\sin(2\pi x)|, & -\frac{1}{3} < x \leq \frac{1}{3} \\ f(x) = \frac{x}{2} - \frac{1}{6} \sin(3\pi x), & \frac{1}{3} \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (4.8)$$

La level-set ϕ est représentée sur la figure 4.8. L'interface $\phi = 0$ est décrite alors par la fonction $y = f(x)$. Il y a trois points singuliers remarquables : $x = -\frac{1}{3}$, $x = 0$ et $x = \frac{1}{3}$ où on observe des points anguleux. En ces points, la courbure est localement infinie. Il sera intéressant de regarder comment chacune des techniques capture la courbure en ces 3 points, et ainsi de conclure sur leurs capacités à traiter les fortes courbures. La figure 4.9 représente $|\kappa|$ en fonction de x . Différentes tailles de grilles sont testées de 16^2 à 128^2 . Pour la résolution 128^2 , les deux méthodes sont précises et même la courbure aux 3 points singuliers est correctement calculée. On peut remarquer que la méthode eulérienne classique est moins précise pour les faibles courbures $-1 < x < -0.75$ pour un maillage 128^2 . Pour le maillage 64^2 , cette faiblesse observée pour les petites courbures n'apparaît plus. Mais intéressons-nous plutôt aux cas où la courbure est forte. Pour les cas 32^2 et 16^2 , les courbures modérées et faibles ($|\kappa| < 10$) sont bien résolues par les deux méthodes de calcul de la courbure. En revanche, la méthode classique eulérienne (Eq. (4.5)) capture très mal les fortes courbures ($|\kappa| > 10$). Les points anguleux sont quant à eux complètement invisibles pour la méthode eulérienne de calcul de κ pour les maillages faiblement résolus. Le calcul erroné de la courbure aura des répercussions sur le calcul des sauts à l'interface qui font explicitement référence à la courbure locale. La méthode de calcul de κ par les marqueurs (Eq. (4.6)) reste très précise même pour les maillage peu denses. Pour une résolution de 16^2 , les fortes courbures sont bien calculées, et surtout, les points anguleux restent correctement pris en compte. Nous rappelons juste que chaque cellule de calcul eulérienne possède trois marqueurs. La

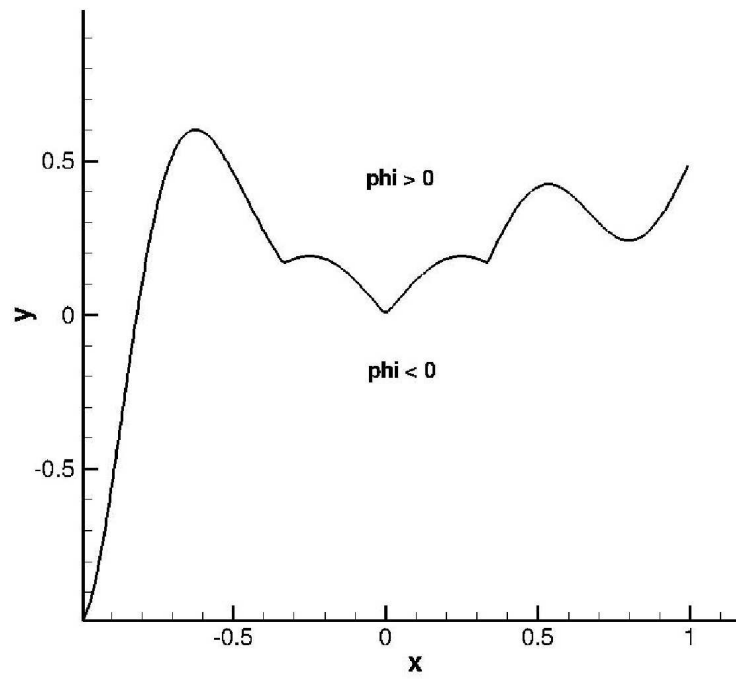


FIGURE 4.8 – Iso-contour $\phi = 0$. ϕ est donnée par les équations (4.7) et (4.8)

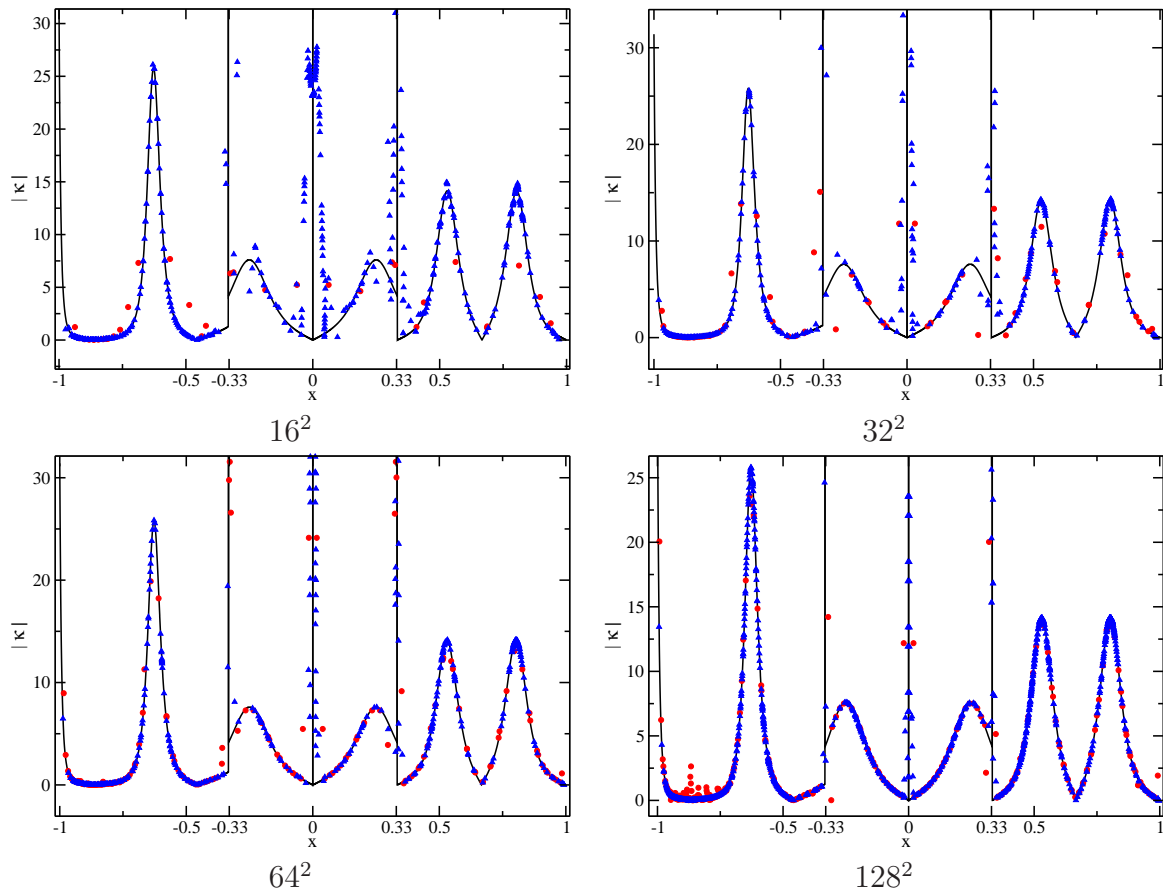


FIGURE 4.9 – Courbure calculée sur l’interface définie par $y = f(x)$ (Eq. 4.7 et 4.8). Ligne continue (noire) : courbure théorique. ● (rouge) : méthode de calcul eulérienne (Eq. (4.5)). ▲ (bleu) : courbure calculée à partir des marqueurs Eq. (4.6)).

supériorité incontestable de la méthode par les particules pour le calcul de la courbure est due à deux choses. La première est liée à la surrésolution de l’interface. En effet, avec 3 marqueurs par maille, la méthode particules/level-set décrit l’interface plus précisément que la méthode level-set simple. Cette sur-résolution est d’autant plus utile dans les zones à fortes courbures où l’interface est étirée avec des filaments. La deuxième raison est due à la méthode même de calcul de la courbure. En effet, les informations nécessaires au calcul de κ avec la méthode des marqueurs sont issues de l’interface elle-même. Le support de calcul de la courbure est restreint à l’interface elle-même, contrairement à la méthode classique eulérienne qui utilise un stencil de points qui ne sont pas nécessairement sur l’interface, et qui extrapole ensuite les courbures calculées hors de l’interface grâce au caractère distance signée de la level-set. Le calcul de la courbure par les marqueurs est beaucoup plus compact. En effet, le calcul de κ en un marqueur \mathbf{X}_p utilise l’information venant de \mathbf{X}_{p-1} et \mathbf{X}_{p+1} (courbe de classe C^1 au marqueur \mathbf{X}_p) qui sont situées dans la même cellule de calcul eulérienne. Ainsi, le stencil est très compact. En revanche, la méthode classique eulérienne utilise un stencil 3×3 de points autour de la cellule (i, j) . Pour les faibles résolutions (ici typiquement 32^2 ou 16^2), les gradients de courbure sur ce stencil peuvent devenir très grands, ce qui altère le calcul de κ au centre du stencil. Le tableau 4.1 récapitule les erreurs en norme L^1 entre la

courbure théorique et la courbure calculée selon les deux méthodes. Globalement, la méthode avec les marqueurs est plus précise que la méthode classique eulérienne.

maillage	méthode eulérienne		méthode lagrangienne	
	erreur L^1	ordre	erreur L^1	ordre
16^2	2.17	-	1.47	-
32^2	1.59	0.45	$4.08 \cdot 10^{-1}$	1.85
64^2	$3.05 \cdot 10^{-1}$	2.38	$1.35 \cdot 10^{-1}$	1.6
128^2	$1.90 \cdot 10^{-1}$	0.68	$6.0 \cdot 10^{-2}$	1.17

TABLE 4.1 – Erreur en norme L^1 et taux de convergence associé entre la courbure théorique et celle calculée par deux méthodes différentes

Ainsi, la méthode particules/level-set sera avantageuse dans les configurations où la sous-résolution met en péril les méthodes classiques de capture d'interface.

Chapitre 5

Validation des différentes méthodes de capture d'interface

Sommaire

5.1	Advection du disque de Zalesak	81
5.2	Déformation d'un disque par un tourbillon (cas test du serpent)	91
5.3	Conclusions sur les méthodes de suivi d'interface	98

Dans ce chapitre, nous nous proposons de comparer les différentes méthodes de suivi d'interface présentées dans les chapitres précédents. L'objectif final étant à terme de faire des simulations LES, le problème du traitement LES de l'équation de transport de l'interface se pose. Une première approche consiste à filtrer l'équation de transport de l'interface, d'en dégager les termes sous-maille qui seront alors modélisés. Une autre approche consiste à garder une description sous-maille de l'interface, c'est-à-dire de garder une précision DNS pour l'interface. C'est par exemple ce que propose Herrmann [48, 51], où deux grilles différentes sont utilisées. Une première grille pour résoudre les équations de Navier-Stokes, et une deuxième grille beaucoup plus raffinée autour de l'interface pour garder une level-set sous-maille par rapport au maillage de résolution de Navier-Stokes. C'est dans cet esprit que l'on cherche à comparer les méthodes de suivi d'interface selon leur comportement face à la sous-résolution. Evidemment, comme prévu, les méthodes de front-tracking paraissent mieux adaptées pour résoudre ce genre de problème. Nous avons donc sélectionné des cas tests où l'interface présente des structures fines avec des sous-résolutions locales et de fortes courbures. Les cas tests retenus devront également proposer des configurations géométriques raides avec des angles et des coins pour l'interface. L'étude de ces configurations sévères est indispensable pour une utilisation future de la méthode de suivi d'interface dans un écoulement 3D turbulent où l'interface peut connaître de très fortes déformations (voir la partie suivante à ce sujet sur la simulation directe d'une nappe dans un champ turbulent).

Voici regroupées dans le tableau 5.1 les différentes méthodes de suivi d'interface testées, ainsi que l'abréviation utilisée par la suite pour désigner chacune de ces méthodes.

Les deux cas tests présentés sont l'advection du disque de Zalesak et la déformation d'un cercle par un tourbillon (cas test du serpent).

Méthode	Abréviation	Référence dans le manuscrit
Méthode Volume of Fluid (VOF) avec reconstruction PLIC	VOF-PLIC	page 39
Méthode Volume of Fluid (VOF) avec schéma TVD	VOF-TVD	page 38
Méthode level-set avec schéma WENO sous forme non conservative (poids pondérés) pour la discrétisation des termes spatiaux dans l'équation d'advection de ϕ	LSET-WENOn _c	page 48
Méthode level-set avec schéma WENO sous forme conservative (poids pondérés) pour la discrétisation des termes spatiaux dans l'équation d'advection de ϕ	LSET-WENOc	page 50
Méthode level-set avec schéma WENO sous forme non conservative (poids optimaux) pour la discrétisation des termes spatiaux dans l'équation d'advection de ϕ	LSET-WENOn _c -opt	page 49
Méthode level-set avec schéma WENO sous forme conservative (poids optimaux) pour la discrétisation des termes spatiaux dans l'équation d'advection de ϕ	LSET-WENOc-opt	page 52
Méthode level-set avec schéma spectral SD (ordre 2) pour la discrétisation des termes spatiaux dans l'équation d'advection de ϕ	LSET-SD-2	page 57
Méthode level-set avec schéma spectral SD (ordre 4) pour la discrétisation des termes spatiaux dans l'équation d'advection de ϕ	LSET-SD-4	page 57
Front-tracking méthode de Shin et Juric	FTR-SHIN-JURIC	page 36
Méthode hybride de couplage particules/level-set	LSET-PART	page 61

TABLE 5.1 – Récapitulatif des méthodes de suivi d'interface utilisées avec leur abréviation.

cas	couleur	méthode
(a)	noir	initial
	rouge	LSET-WENOC
	bleu	LSET-WENONC
	vert	LSET-WENOC-opt
(b)	orange	LSET-WENONC-opt
	noir	initial
	rouge	VOF-PLIC
	bleu	VOF-TVD
(c)	noir	initial
	rouge	LSET-SD-2
	bleu	LSET-SD-4
(d)	noir	initial
	rouge	FTR-SHIN-JURIC
	bleu	LSET-PART

TABLE 5.2 – Correspondance entre les codes couleur et les méthodes utilisées en fonction du cas étudié. Les cas (a), (b), (c) et (d) font référence aux légendes des cas-tests de Zalesak et du serpent.

5.1 Advection du disque de Zalesak

La rotation d'un disque épuré d'une fente dans un champ de vitesse tourbillonnant est étudiée. Ce cas test vise à mettre en évidence la capacité de la méthode à capturer des structures fines avec une géométrie raide (ici, des coins). Les changements de courbure sont brutaux.

Dans un domaine carré $[0, 100 m]^2$, un disque privé d'une fente est advecté autour du centre du domaine par un champ de vitesse stationnaire donné par :

$$\begin{cases} u(x, y) = \frac{\pi}{314} (50 - y) \\ v(x, y) = \frac{\pi}{314} (x - 50) \end{cases}$$

Le disque a pour rayon $R = 15 m$ et est initialement centré en $(50 m, 75 m)$. La fente a pour largeur $H = 5 m$. Le disque fait un tour complet en $628 s$ pour revenir exactement à sa position initiale. Le pas de temps choisi est $\Delta t = \Delta x$. Sur les figures 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6, 5.7, on a représenté le disque après une rotation complète, soit $628 s$. Différents maillages ont été représentés, de 256^2 à 32^2 . Nous sommes volontairement descendus à des maillages très grossiers pour étudier l'effet de sous-résolution. Le maillage 16^2 est définitivement inutilisable, la fente n'étant même plus captée par la condition initiale. Pour la légende, la correspondance entre les couleurs et la méthode utilisée peut être faite grâce à la table 5.2. Juste une petite remarque à propos des schémas WENO dans l'écriture optimale des poids. On montre très facilement que les formulations conservative et non-conservative sont strictement équivalentes pour l'utilisation optimale des poids lorsque la composante u de la vitesse ne dépend pas de x et lorsque la composante v ne dépend pas de y . Dans le cas test de Zalesak, on est justement dans ce cas-là. Ainsi, nous ne ferons pas de distinction entre LSET-WENOC-opt et LSET-WENONC-opt, que nous noterons simplement LSET-WENO-opt dans le cas test de Zalesak.

Chapitre 5. Validation des différentes méthodes de capture d'interface

Les comparaisons s'effectuent ainsi. Les méthodes level-set/WENO sont comparées entre elles, ainsi que les méthodes VOF, les méthodes SD et les méthodes couplées à des particules. Puis la méthode la plus précise de son "groupe" est comparée aux autres meilleures méthodes de chaque groupe. Et ceci pour différentes résolutions. A chaque fois, c'est l'iso- $\phi = 0$ (pour la level-set) ou l'iso- $C = 0.5$ (pour la fonction couleur qui est représentée). En particulier, pour FTR-SHIN-JURIC, c'est la fonction couleur reconstruite à partir des marqueurs qui est représentée. De même pour LSET-PART où l'on représente la level-set reconstruite à partir des marqueurs. A noter que lorsque la level-set est utilisée, il n'y a pas de redistance. En effet, le champ de vitesses entraîne une rotation en bloc des lignes de niveau. Pour la méthode SD, c'est le nombre de degrés de liberté qui est pris en compte. Par exemple, pour un maillage 256^2 , on considère 256 degrés de liberté dans chaque direction. Pour LSET-SD-4, il y a donc 64 SV ; chaque SV est subdivisée en 4 CV.

Les figures 5.1 et 5.2 représentent les solutions obtenues pour un maillage 256^2 . La

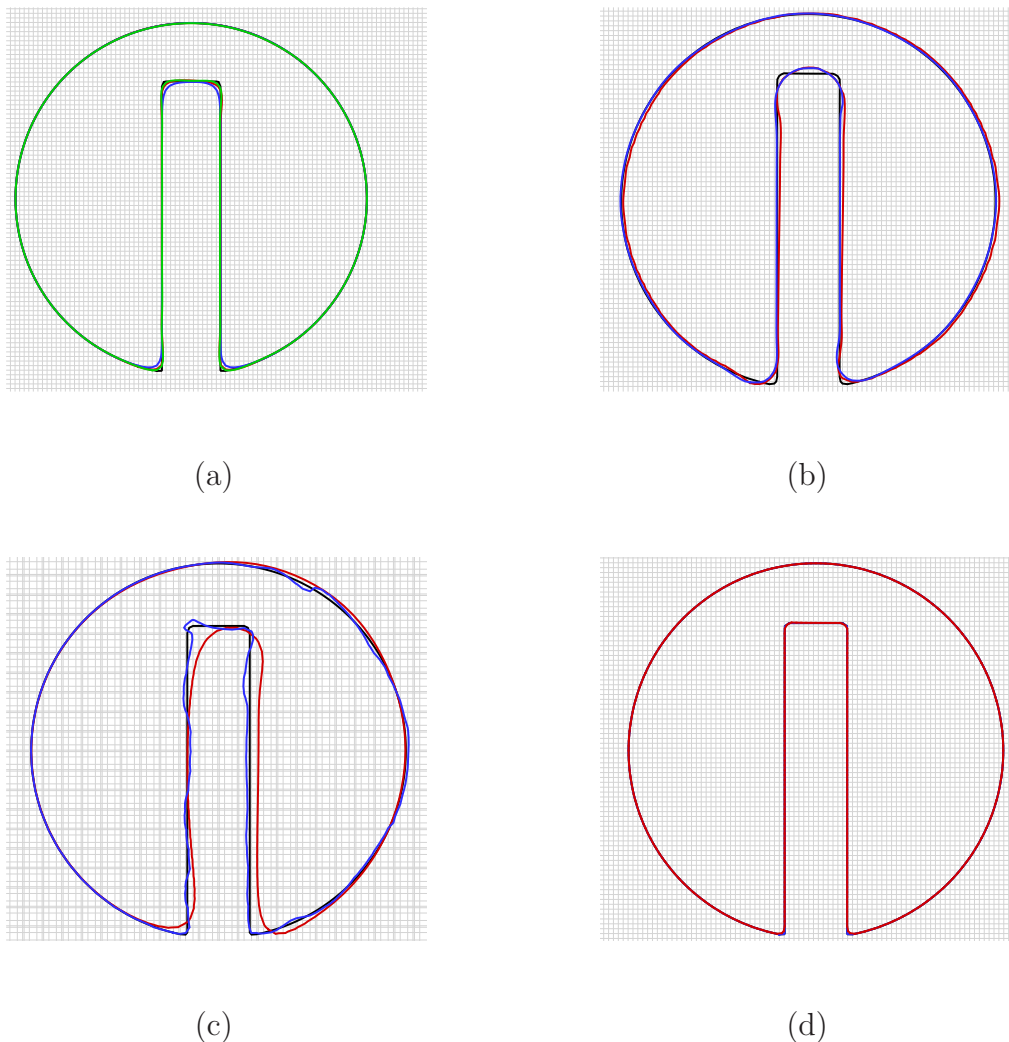


FIGURE 5.1 – Comparaison des méthodes de suivi d'interface après une rotation du disque de Zalesak. Maillage 256^2 . Voir le tableau 5.2 pour la légende.

résolution spatiale est grande et toutes les méthodes sont précises sauf LSET-SD-2 où un décalage de la fente apparaît. L'arrondissement des coins de la fente mesure la dissipation du schéma. Pour les schémas LSET-WENO, les coins sont mieux respectés par la version conservative que par la version non conservative. LSET-WENO-opt est très précis sur les coins. Ainsi, la version conservative avec poids optimaux est la version la moins dissipative parmi les méthodes LSET-WENO. Les méthodes VOF sont beaucoup plus dissipatives (avec coins fortement arrondis) même pour des gros maillages. De plus, un léger décalage de la fente est observé pour VOF-PLIC. Pour la méthode SD, la version LSET-SD-2 est déjà très imprécise pour un maillage 256^2 (fort décalage de la fente). Ce décalage disparaît pour LSET-SD-4. En revanche, des oscillations autour de $\phi = 0$ apparaissent, ce qui montre qu'une limitation des flux serait nécessaire pour LSET-SD-4. Pour les méthodes où un couplage avec des particules a lieu, FTR-SHIN-JURIC et LSET-PART sont toutes deux très précises. FTR-SHIN-JURIC est légèrement plus dissipative que LSET-PART dans les coins. La figure 5.2 compare les techniques les plus précises de chaque catégorie. La méthode la plus dissipative est la méthode VOF (ici VOF-TVD) alors que la plus précise reste LSET-PART. La méthode LSET-SD-4 est très précise aussi, mais semble instable du fait des oscillations autour de l'iso- $\phi = 0$. La méthode LSET-WENO-opt reste un très bon compromis. En effet, on ne retrouve pas les lourdeurs propres aux méthodes par marqueurs et la dissipation reste modérée, surtout lorsque la version optimale des poids est utilisée.

Les figures 5.3 et 5.4 représentent les méthodes pour un maillage 128^2 . Les méthodes LSET-WENO restent précises (pas de décalage de la fente), mais dissipatives. Encore une fois, la version conservative limite la dissipation numérique, surtout lorsqu'une reconstruction optimale des poids WENO est opérée. Les méthodes VOF sont encore plus dissipatives et en plus, la largeur de la fente est augmentée. Pour les méthodes SD, LSET-SD-2 provoque en plus d'un large décalage de la fente une atténuation de sa hauteur. LSET-SD-4 est précise, mais instable (oscillations). FTR-SHIN-JURIC et LSET-PART restent très précises avec un léger avantage pour LSET-PART. La figure 5.4 compare les méthodes entre elles. La méthode LSET-PART permet de retrouver la condition initiale avec grande précision. Ensuite, LSET-WENOopt reste précise malgré la dissipation dans les coins. Cette dissipation est moindre avec LSET-SD-4, mais l'oscillation trop marquée de l'interface posera des problèmes dans le calcul de la courbure. VOF-TVD est la méthode la plus dissipative avec un élargissement global de la fente.

Les figures 5.5 et 5.6 représentent les méthodes pour un maillage 64^2 . Pour les techniques LSET-WENO, la méthode LSET-WENOnc est dissipative et ne respecte plus la forme sur le haut du cercle qui est pourtant une zone lisse sans raideur ni discontinuité de la courbure. Dans cette configuration où la résolution commence à se faire ressentir, LSET-WENO-opt capture l'interface de façon tout à fait satisfaisante. Le schéma VOF-TVD montre ses limites et la fente n'est plus capturée, même si elle contient au départ trois mailles. Mais avec l'utilisation de VOF-TVD, l'interface est étalée sur deux ou trois mailles, c'est-à-dire la largeur de la fente, ce qui explique la disparition de cette dernière avec l'utilisation de VOF-TVD. L'ordre de LSET-SD-2 est trop faible et la fente n'est plus capturée. En revanche, LSET-SD-4 s'avère très précise lorsque la résolution du maillage diminue. Les problèmes d'oscillations semblent même s'atténuer un peu. Les méthodes couplées à des particules restent précises, même si de la dissipation numérique commence à apparaître avec FTR-SHIN-JURIC dans les coins. La figure 5.6 compare les méthodes entre elles. La supériorité de la méthode LSET-PART est encore vraie. Ceci vient de la description sous-maille de l'interface grâce aux particules

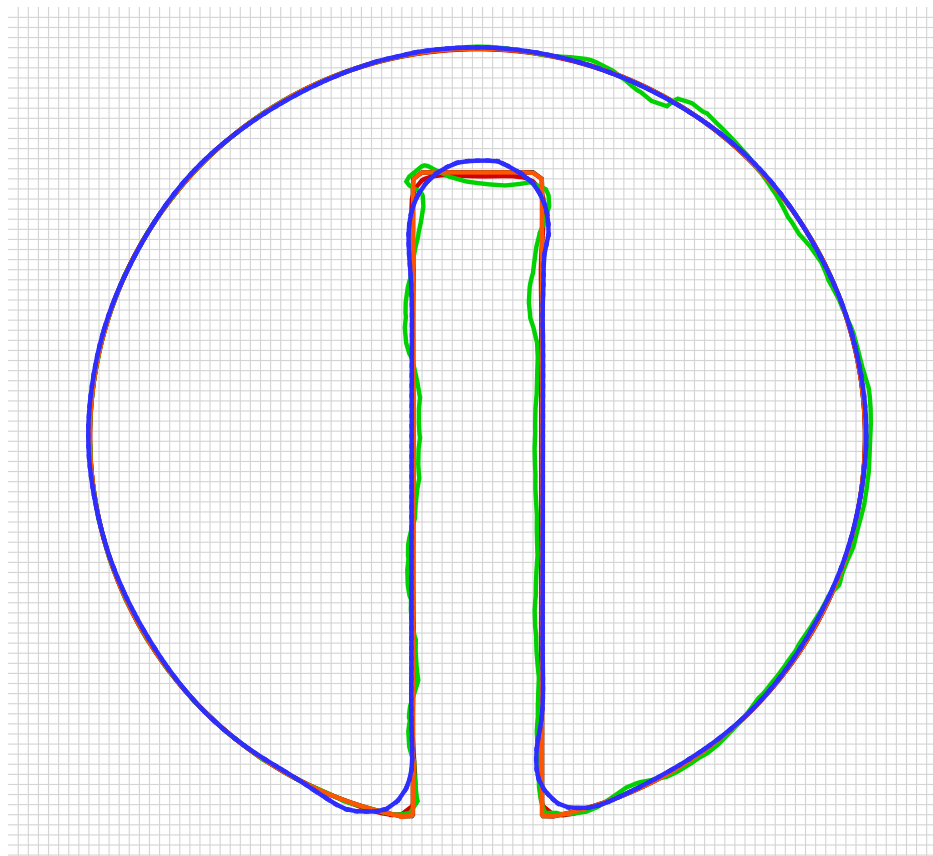


FIGURE 5.2 – noir :initial; rouge :LSET-WENOopt; bleu :VOF-TVD; vert :LSET-SD-4; orange :LSET-PART . 256^2

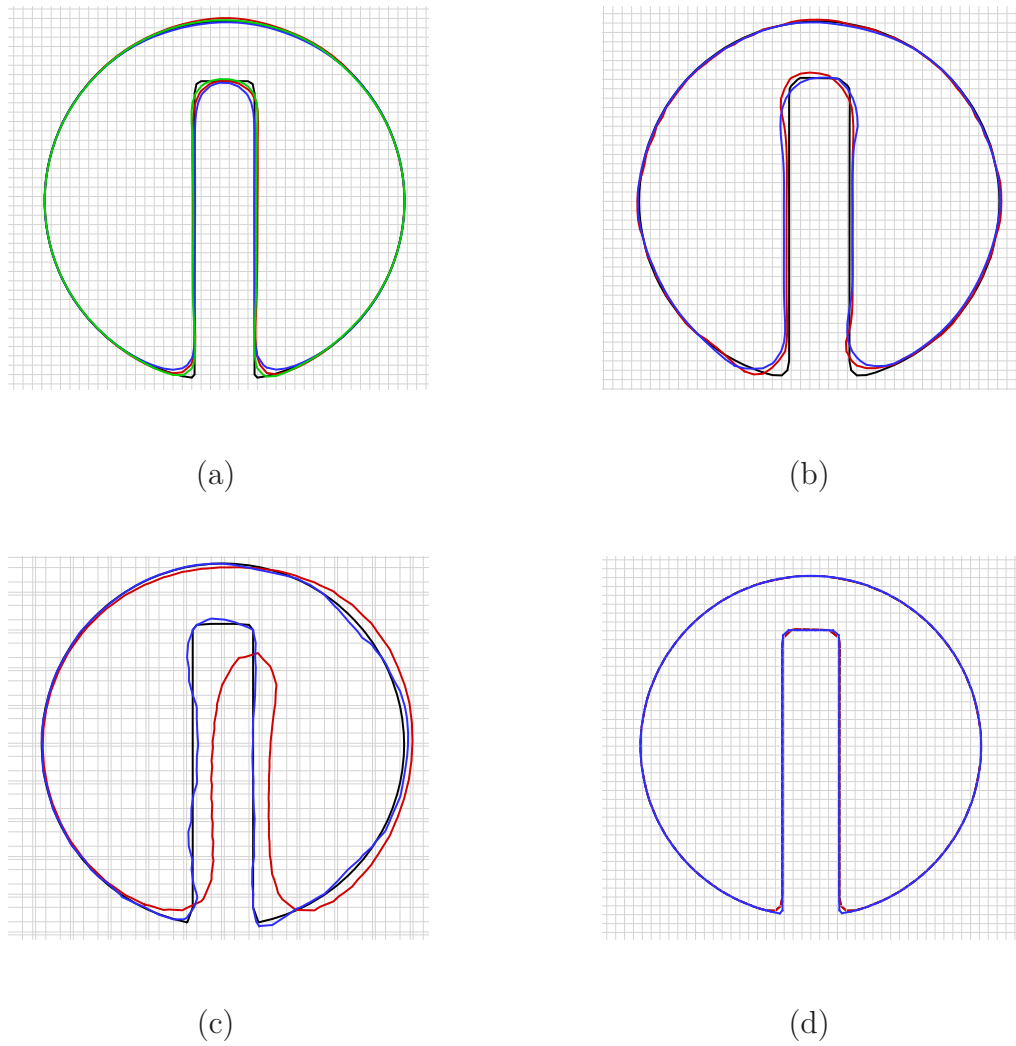


FIGURE 5.3 – Comparaison des méthodes de suivi d’interface après une rotation du disque de Zalesak. Maillage 128^2 . Voir le tableau 5.2 pour la légende.

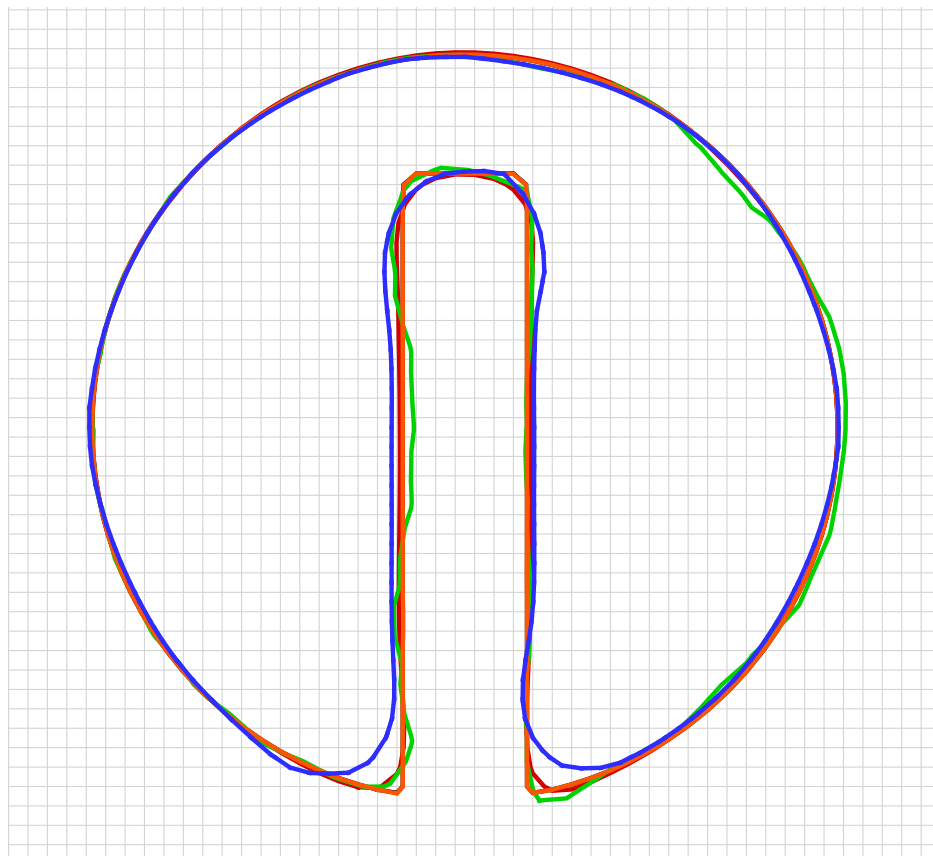


FIGURE 5.4 – noir :initial; rouge :LSET-WENOopt; bleu :VOF-TVD; vert :LSET-SD-4; orange :LSET-PART . 128^2

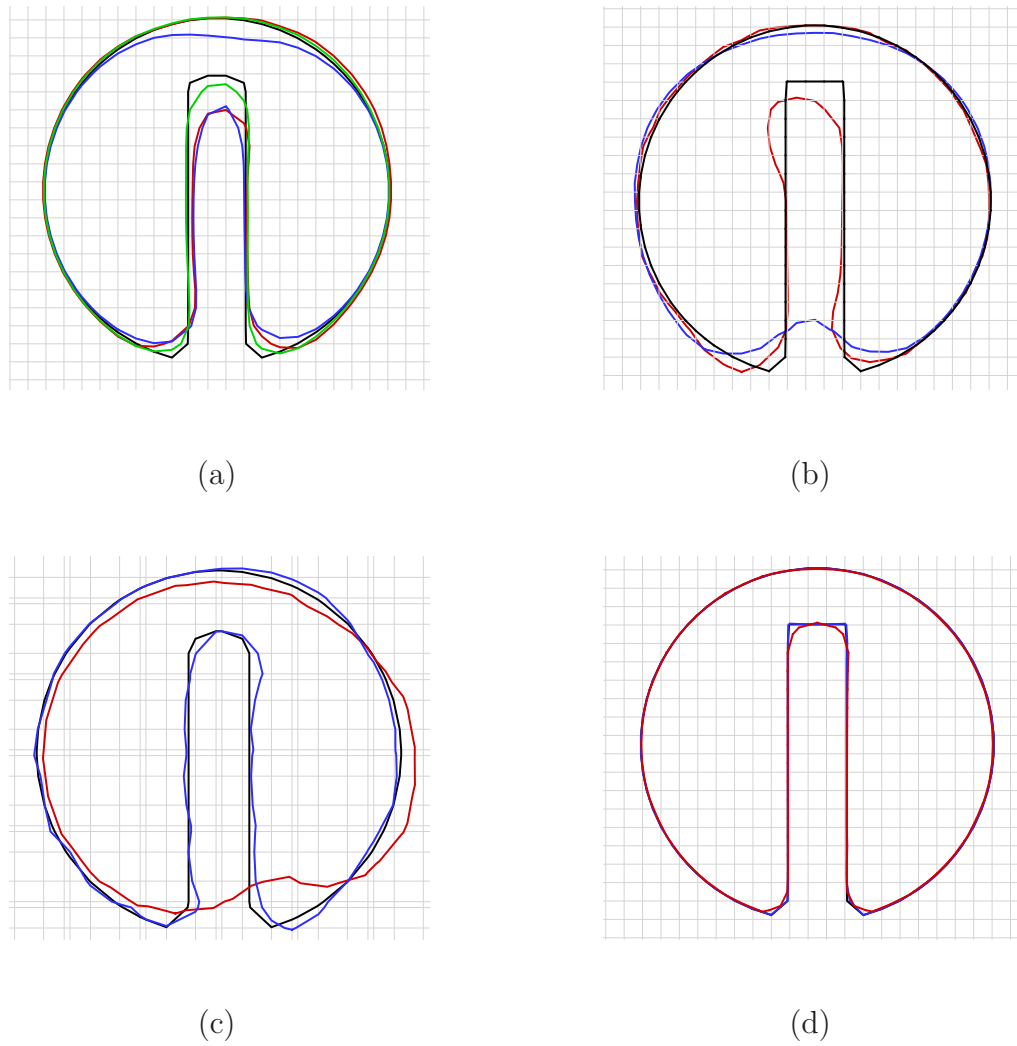


FIGURE 5.5 – Comparaison des méthodes de suivi d’interface après une rotation du disque de Zalesak. Maillage 64^2 . Voir le tableau 5.2 pour la légende.

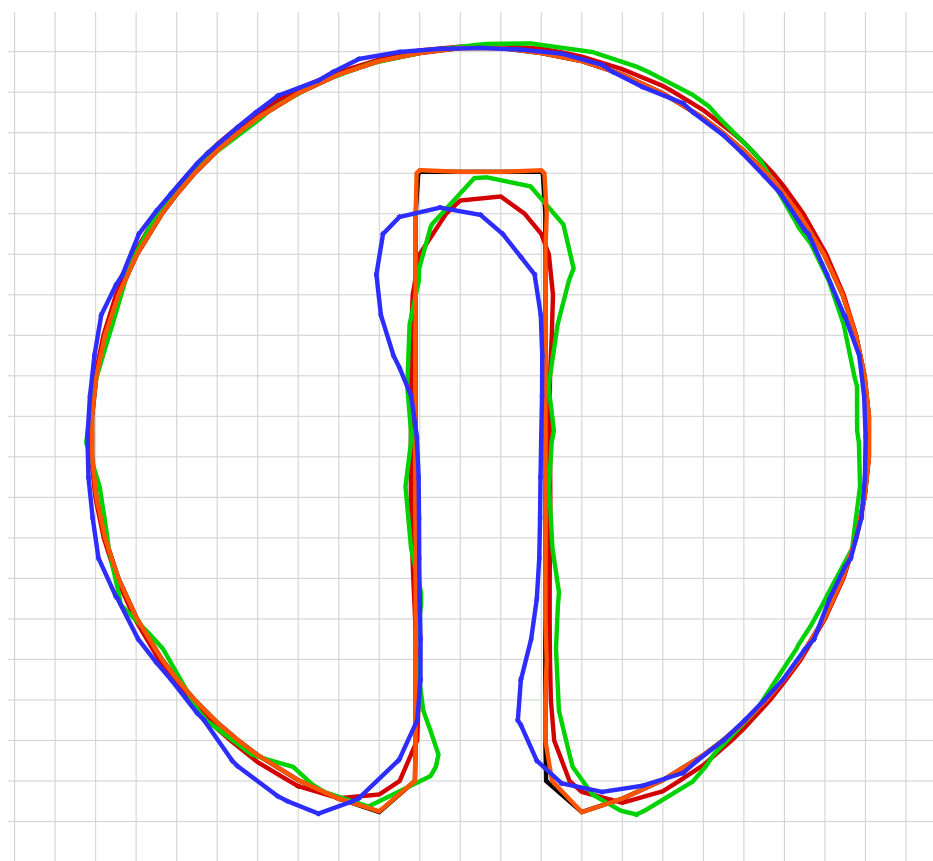


FIGURE 5.6 – noir :initial; rouge :LSET-WENOopt; bleu :VOF-PLIC; vert :LSET-SD-4; orange :LSET-PART . 64²

(3 particules par maille). LSET-SD-4 et LSET-WENO-opt ont un degré de précision comparable, LSET-SD-4 étant moins lisse que LSET-WENO-opt.

La figure 5.7 représente les méthodes pour un maillage 32^2 . La sous-résolution est poussée

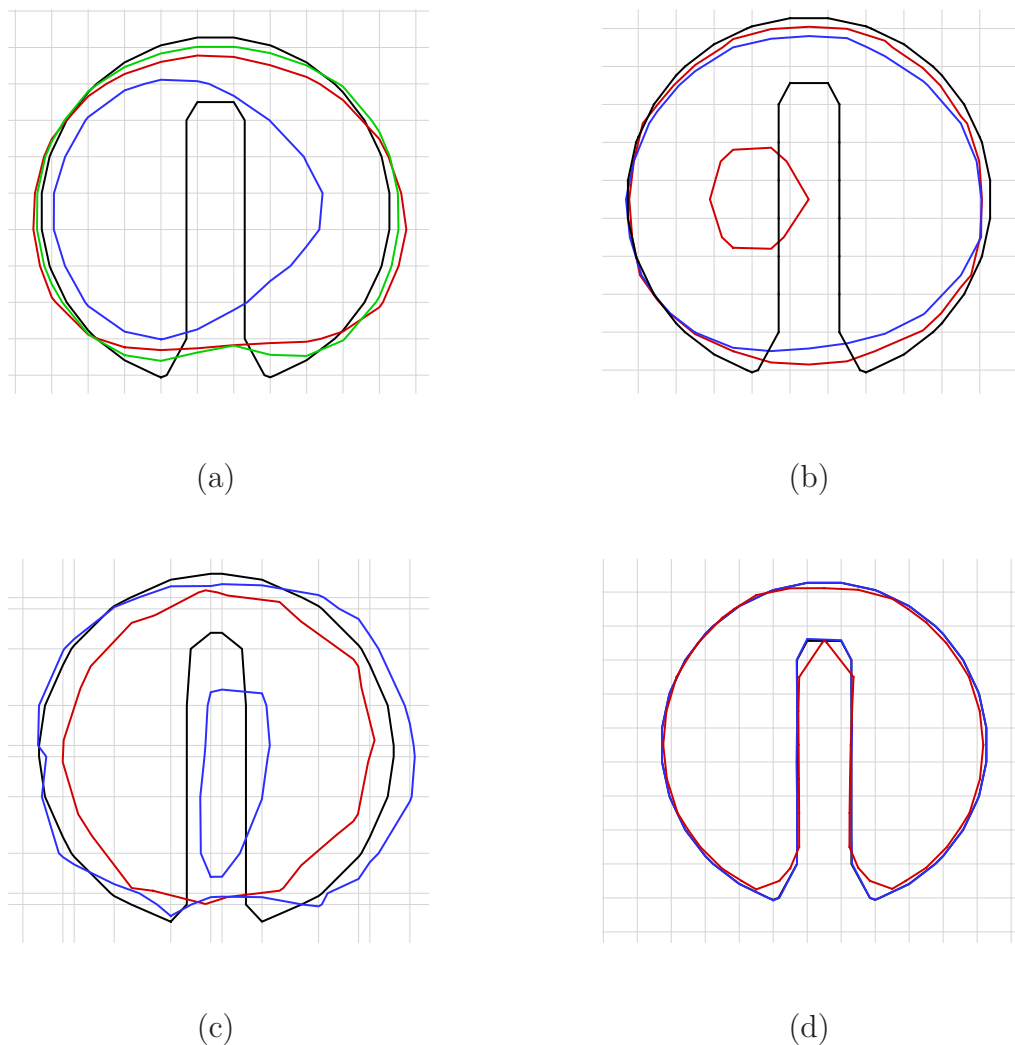


FIGURE 5.7 – Comparaison des méthodes de suivi d’interface après une rotation du disque de Zalesak. Maillage 32^2 . Voir le tableau 5.2 pour la légende.

à l’extrême. Les méthodes couplées à des particules captent l’interface de façon très satisfaisante. Aucune méthode, à part LSET-SD-4, ne capte la fente. Malgré la sous-résolution marquée, LSET-SD-4 restitue la forme globale de l’interface, et affiche une fente dont la position reste cohérente avec la condition initiale.

Sur la table 5.3, on a représenté les erreurs en norme L_1 entre la configuration initiale et la configuration après une rotation du disque. Les ordres de convergence associés sont également représentés. L’erreur en norme L_1 est ainsi calculée dans le cas d’une fonction couleur :

$$e_{L_1} = \frac{1}{\text{card}(\mathcal{D})} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} C(\mathbf{x}) - C_{ini}(\mathbf{x})$$

méthode	maillage	erreur L_1	ordre
LSET-WENO _c	256 × 256	2.56 10 ⁻⁴	2.65
	128 × 128	1.61 10 ⁻³	1.92
	64 × 64	6.09 10 ⁻³	1.77
	32 × 32	2.08 10 ⁻²	-
	16 × 16	1.91 10 ⁻²	-
LSET-WENO _{nc}	256 × 256	3.21 10 ⁻⁴	1.76
	128 × 128	1.09 10 ⁻³	2.76
	64 × 64	7.37 10 ⁻³	2.12
	32 × 32	3.20 10 ⁻²	-
	16 × 16	3.08 10 ⁻²	-
LSET-WENO-opt	256 × 256	2.91 10 ⁻⁴	1.96
	128 × 128	1.13 10 ⁻³	1.38
	64 × 64	2.96 10 ⁻³	2.12
	32 × 32	1.28 10 ⁻²	0.5
	16 × 16	1.81 10 ⁻²	-
VOF-PLIC	256 × 256	3.70 10 ⁻³	-
	128 × 128	3.53 10 ⁻³	1.36
	64 × 64	9.07 10 ⁻³	2.19
	32 × 32	4.15 10 ⁻²	1.6
	16 × 16	1.25 10 ⁻¹	-
VOF-TVD	256 × 256	4.09 10 ⁻³	1.37
	128 × 128	1.06 10 ⁻²	1.77
	64 × 64	3.59 10 ⁻²	0.77
	32 × 32	6.11 10 ⁻²	1.72
	16 × 16	0.20	-
LSET-SD-2	256 × 256	3.80 10 ⁻³	1.68
	128 × 128	1.22 10 ⁻²	0.59
	64 × 64	1.83 10 ⁻²	0.73
	32 × 32	3.04 10 ⁻²	0.26
	16 × 16	3.63 10 ⁻²	-
LSET-SD-4	256 × 256	1.30 10 ⁻³	0.72
	128 × 128	2.14 10 ⁻³	0.79
	64 × 64	3.68 10 ⁻³	2.35
	32 × 32	1.87 10 ⁻²	0.61
	16 × 16	2.86 10 ⁻²	-
FTR-SHIN-JURIC	256 × 256	6.49 10 ⁻⁴	0.98
	128 × 128	1.28 10 ⁻³	0.95
	64 × 64	2.48 10 ⁻³	0.64
	32 × 32	3.85 10 ⁻³	0.19
	16 × 16	4.39 10 ⁻³	-
LSET-PART	256 × 256	9.74 10 ⁻⁶	0.49
	128 × 128	1.37 10 ⁻⁵	2.89
	64 × 64	1.01 10 ⁻⁴	1.39
	32 × 32	2.65 10 ⁻⁴	3.22
	16 × 16	2.47 10 ⁻³	-

TABLE 5.3 – Erreurs en norme L_1 avec ordres associés pour le cas test de Zalesak.

5.2 Déformation d'un disque par un tourbillon (cas test du serpent)

où \mathcal{D} est l'ensemble du domaine et C la fonction couleur. Pour les méthodes utilisant une level-set pour localiser l'interface, nous avons reconstruit une fonction couleur C à partir de ϕ de cette façon :

$$C(\mathbf{x}) = H(\phi(\mathbf{x}))$$

où H est la fonction Heaviside au sens de Sussman [140]. Ainsi, toutes les méthodes pourront être comparées entre elles en utilisant la même norme. Pour les méthodes LSET-WENO, la méthode avec poids optimums LSET-WENO-opt est globalement plus précise que les méthodes avec les poids pondérés (sauf pour le cas 128^2 que l'on n'explique pas). Pour les méthodes VOF, la méthode avec reconstruction géométrique VOF-PLIC est plus précise que l'approche TVD. En revanche, l'ordre de convergence s'effondre aux grandes résolutions pour VOF-PLIC. Les méthodes LSET-SD sont plus précises quand l'ordre augmente, mais l'ordre de convergence reste limité à l'ordre 1 pour ce cas test. Les méthodes couplées à des particules (LSET-PART et FTR-SHIN-JURIC) sont les méthodes les plus précises. A part pour FTR-SHIN-JURIC, il est difficile de mettre en avant un ordre de convergence clair.

5.2 Déformation d'un disque par un tourbillon (cas test du serpent)

On présente maintenant le cas test du serpent introduit par Bell, Collela et Glaz [11]. Ce cas test a pour but d'étudier le comportement d'une méthode de suivi d'interface lorsque cette dernière s'étire sous l'effet d'un cisaillement jusqu'à former un ligament. Les effets de sous-résolution sont ainsi mesurés grâce à ce cas test. De telles configurations seront rencontrées lors de la simulation d'écoulements turbulents à interface, typiquement l'atomisation d'une nappe.

On considère un domaine carré $[0, 1]^2$ dans lequel un cercle de rayon 0.15 est placé à l'instant initial au point (0.5, 0.75). Un champ de vitesse \mathbf{u} tournoyant circulaire est défini par le potentiel des vitesses suivant :

$$\psi = \frac{1}{\pi} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y)$$

Sur les figures 5.8, 5.9, 5.10 et 5.11, les résultats de simulation sont présentés après un temps de simulation de 3 s pour différentes résolutions (256^2 à 32^2). La légende correspondante à ces figures est celle de la table 5.2 (page 81). Encore ici, comme pour le cas test de Zalesak, les méthodes sont comparées au sein d'un même groupe (level-set, VOF, schémas spectraux et méthodes avec couplage de particules). Lorsque la level-set est utilisée, il n'y a pas d'équation de redistance (voir la thèse de Couderc [26] pour une étude sur l'influence de la redistanciation). Trois particules par maille sont utilisées dans le cas des méthodes couplées avec des marqueurs.

La figure 5.8 représente les méthodes pour un maillage 256^2 . Les méthodes LSET-WENO sont extrêmement précises à haute résolution. Les deux points à forte courbure (tête et queue du serpent) sont bien représentés par ces méthodes. On n'observe pas d'épaississement artificiel de la queue du serpent. A noter la version LSET-WENO-opt qui est pratiquement superposée à la solution lagrangienne décrite par des marqueurs d'interface. Dès 256^2 , les méthodes VOF souffrent de la sous-résolution. La tête du serpent n'est pas capturée

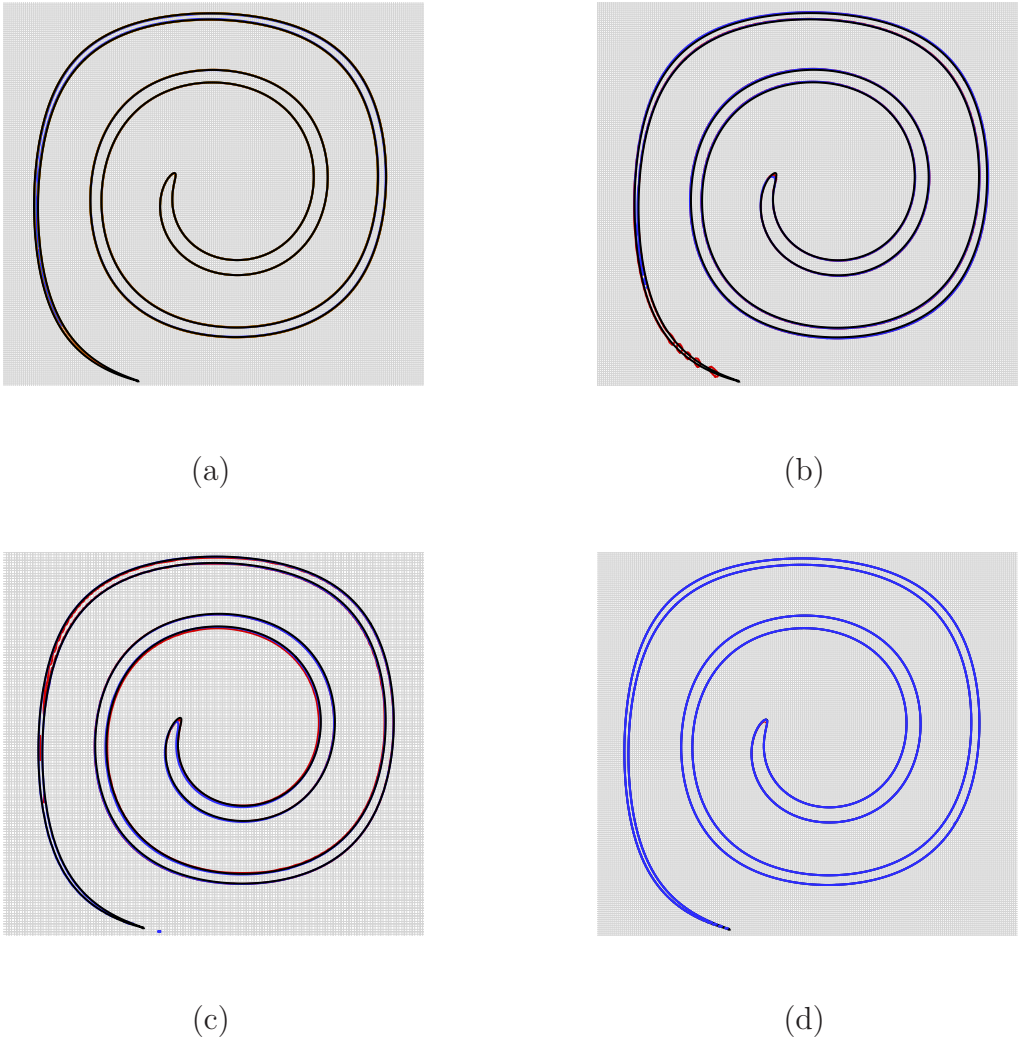


FIGURE 5.8 – Comparaison des méthodes de suivi d'interface dans le cas test du serpentini après 3 s. Maillage 256^2 . Voir le tableau 5.2 page 81 pour la légende.

5.2 Déformation d'un disque par un tourbillon (cas test du serpent)

précisément. La version TVD est mise à défaut dans la dernière partie de la queue. La version VOF-PLIC assure une conservation de la masse grâce à des gouttes qui forment l'extrémité de la queue du serpent. Ces gouttes sont plus épaisses que l'épaisseur réelle de la queue. Ceci garantit une conservation globale de la masse du serpent. Pour les méthodes LSET-SD, la précision est grande également. La version du 4^{ème} ordre capte très précisément la queue du serpent (moins bien la tête). LSET-SD-4 rajoute même une goutte en aval de la queue. Les méthodes couplées à des marqueurs sont de loin les plus précises. A noter la très légère supériorité de LSET-PART par rapport à FTR-SHIN-JURIC au niveau de la tête du serpent.

La figure 5.9 représente les méthodes pour un maillage 128^2 . La méthode LSET-WENOc

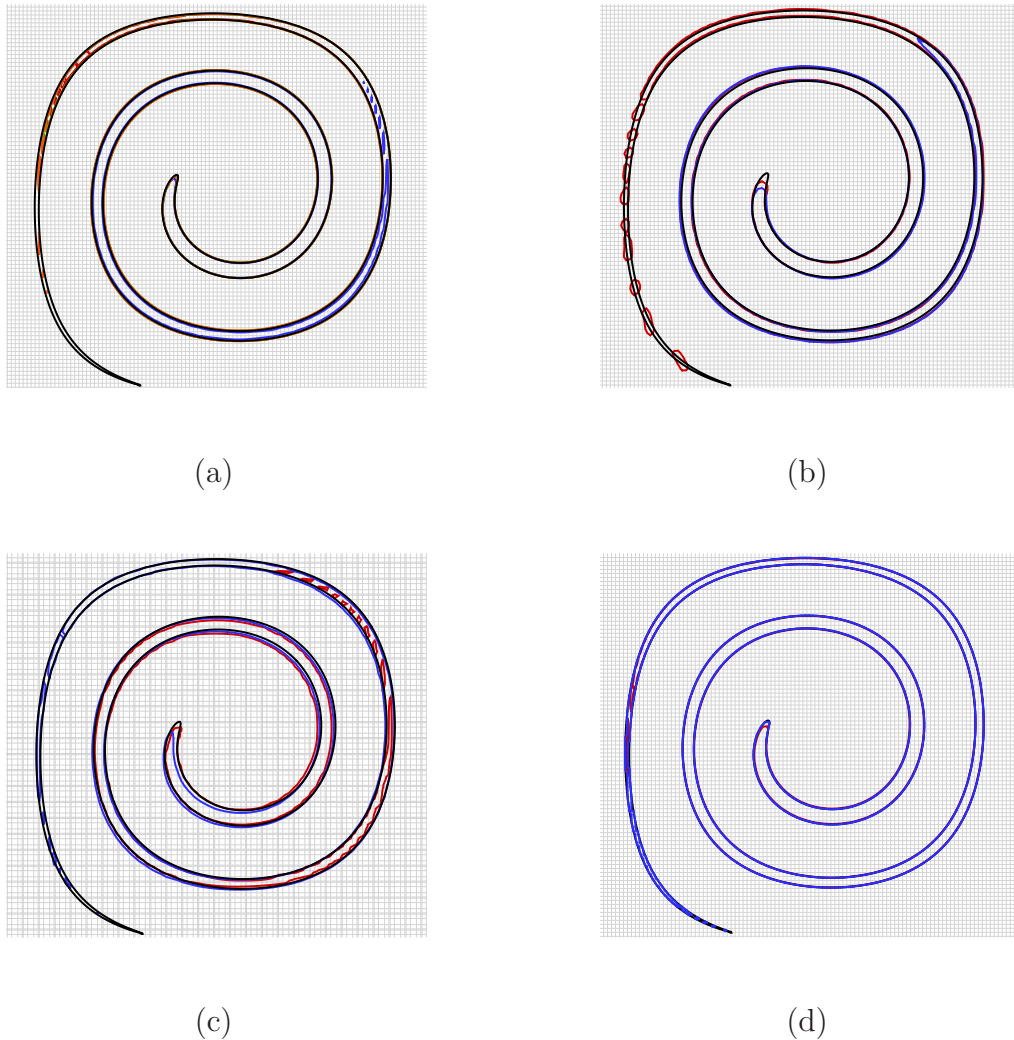


FIGURE 5.9 – Comparaison des méthodes de suivi d'interface dans le cas test du serpent après 3 s. Maillage 128^2 . Voir le tableau 5.2 page 81 pour la légende.

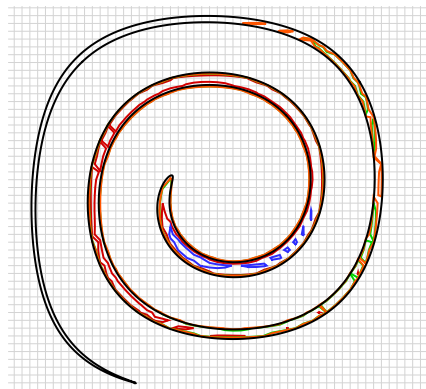
manque de précision puisque la deuxième partie du serpent n'est pas capturée. La passage à une version conservative semble améliorer la situation. Les poids des WENO, lorsqu'ils

sont exprimés sous une forme optimale, améliore encore l'effet de sous-résolution. A la queue du serpent, l'interface est morcellée en gouttelettes, mais l'épaisseur est respectée. Pour les méthodes VOF, le nez du serpent est très mal résolu. Avec VOF-PLIC, la queue du serpent dégénère en chapelet de gouttelettes. Ces gouttelettes ne sont pas physiques (il n'y a pas de tension de surface qui régule la rupture de l'interface) mais sont dues à une sous-résolution. VOF-TVD semble légèrement sur-épaissir l'interface. Avec les méthodes LSET-SD, l'interface est légèrement décalée. La version du second ordre souffre d'imprécision. En revanche, la version au 4^{ème} ordre est très précise pour capturer la queue du serpent (et donc les zones faiblement résolues). Comme pour VOF-PLIC, l'extrémité de la queue dégénère en gouttelettes, mais pour LSET-SD-4, l'épaisseur de la queue du serpent est respectée. Les méthodes couplées à des marqueurs sont extrêmement précises. LSET-PART capture la queue du serpent jusqu'à l'extrémité. A noter une défaillance pour FTR-SHIN-JURIC au niveau du nez du serpent.

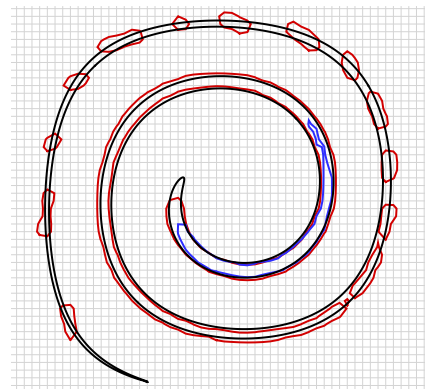
La figure 5.10 représente les méthodes pour un maillage 64^2 . Pour les méthodes LSET-WENO, lorsque les poids pondérés sont utilisés, seule la version conservative peut être envisagée pour une résolution de 64^2 . La formulation non conservative perd même la forme du serpent. Une utilisation des poids améliore la représentation du serpent, notamment dans les zones sous-résolues. A noter que les zones fortement sous-résolues sont perdues avec la méthode LSET-WENO. Pour un maillage 64^2 , VOF-TVD ne capte plus la forme du serpent. Avec VOF-PLIC, l'interface a dégénéré en grosses gouttes. Pour les méthodes LSET-SD, la version au second ordre est inadaptée pour de telles résolutions. La version au 4^{ème} ordre montre un fort décalage au niveau de la forme du serpent. La queue est capturée assez loin, mais l'interface est mal positionnée. FTR-SHIN-JURIC commence à montrer ses limites, alors que l'interface capturée par LSET-PART reste de qualité tout à fait acceptable.

La figure 5.11 représente les méthodes pour un maillage 32^2 . Ici, la sous-résolution atteint un niveau maximum. Le niveau suivant (16^2) montre bien souvent une destruction de l'interface. Pour les méthodes LSET-WENO, seules les versions où les poids des WENO sont exprimés sous leur forme optimum, capture un morceau d'interface, très incomplet d'ailleurs. Pour VOF-TVD, l'interface a disparu et pour VOF-PLIC, l'interface n'est plus qu'une succession de grosses gouttes non physiques. LSET-SD-4 semble capturer la queue du serpent assez loin. Cependant le décalage est fort. De plus, l'interface est "prolongée" plus loin que l'extrémité de la queue. FTR-SHIN-JURIC ne parvient plus à capturer l'interface. En revanche LSET-PART reste tout à fait convenable. D'ailleurs, la qualité de résolution du nez du serpent est remarquable. Il semble étrange que LSET-PART capture correctement l'interface alors que FTR-SHIN-JURIC la perd complètement bien que les deux méthodes soient toutes deux basées sur un couplage avec des marqueurs. Pour FTR-SHIN-JURIC, ce n'est pas l'aspect lagrangien des particules qui est à remettre en cause, mais plutôt la façon dont la fonction indicatrice est reconstruite à partir des marqueurs (cf Eq. (2.1)) ainsi que le reseedng.

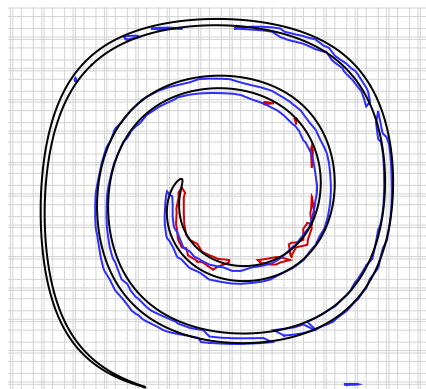
Sur la figure 5.12, l'évolution temporelle de la masse du serpent est représentée pour différents maillages et pour les différentes méthodes de suivi d'interface présentées précédemment. La masse est supposée rester constante. Lorsque les poids des WENO sont calculés de façon pondérée, la version non conservative LSET-WENOnc est catastrophique pour la masse. Des pertes allant jusqu'à 30 % de la masse initiale peuvent être atteintes, et ceci même pour des maillages denses (ici 128^2). La version conservative améliore grandement la perte de masse qui est de moins de 5 % pour la même résolution. Avec un calcul optimal des poids, la



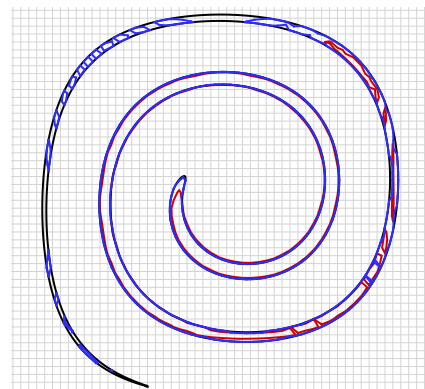
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE 5.10 – Comparaison des méthodes de suivi d'interface dans le cas test du serpent après 3 s. Maillage 64^2 . Voir le tableau 5.2 page 81 pour la légende.

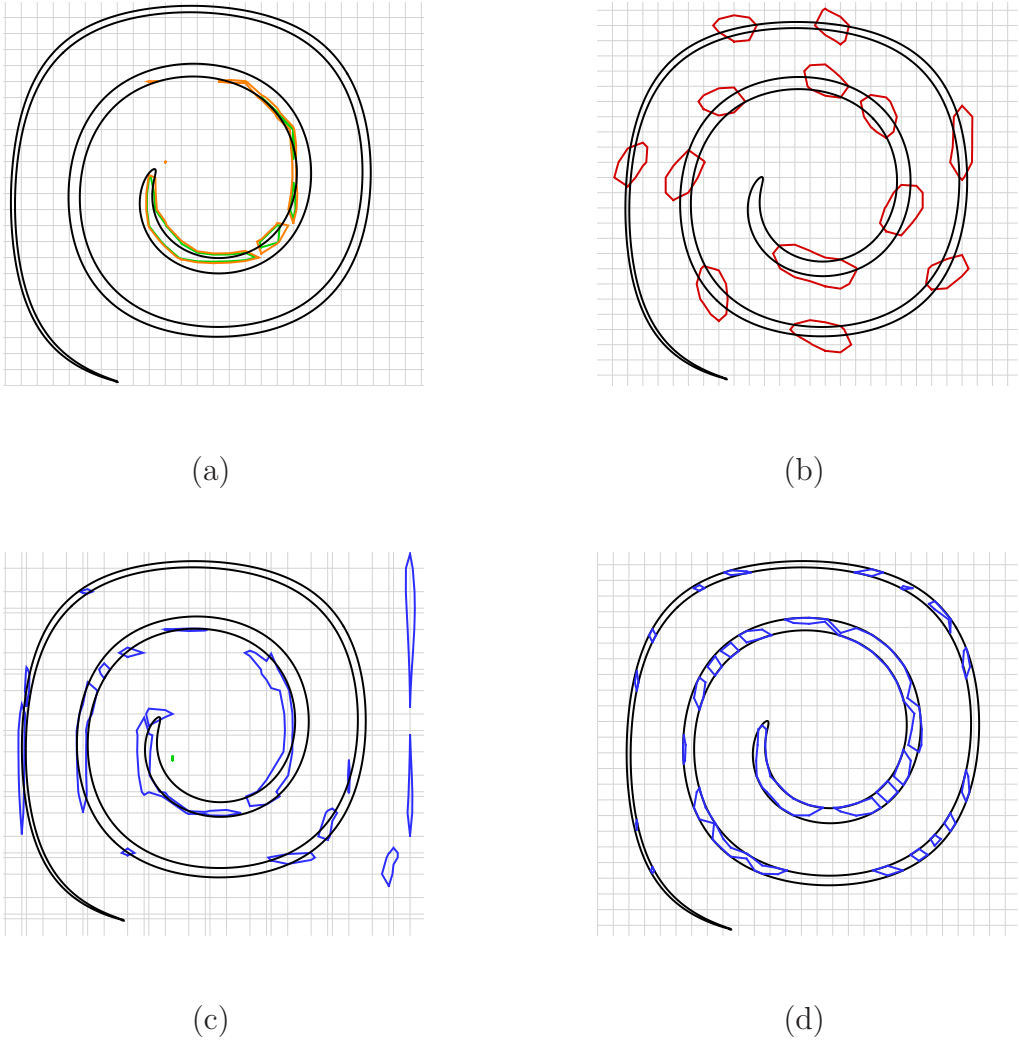


FIGURE 5.11 – Comparaison des méthodes de suivi d'interface dans le cas test du serpentini après 3 s. Maillage 32^2 . Voir le tableau 5.2 page 81 pour la légende.

5.2 Déformation d'un disque par un tourbillon (cas test du serpent)

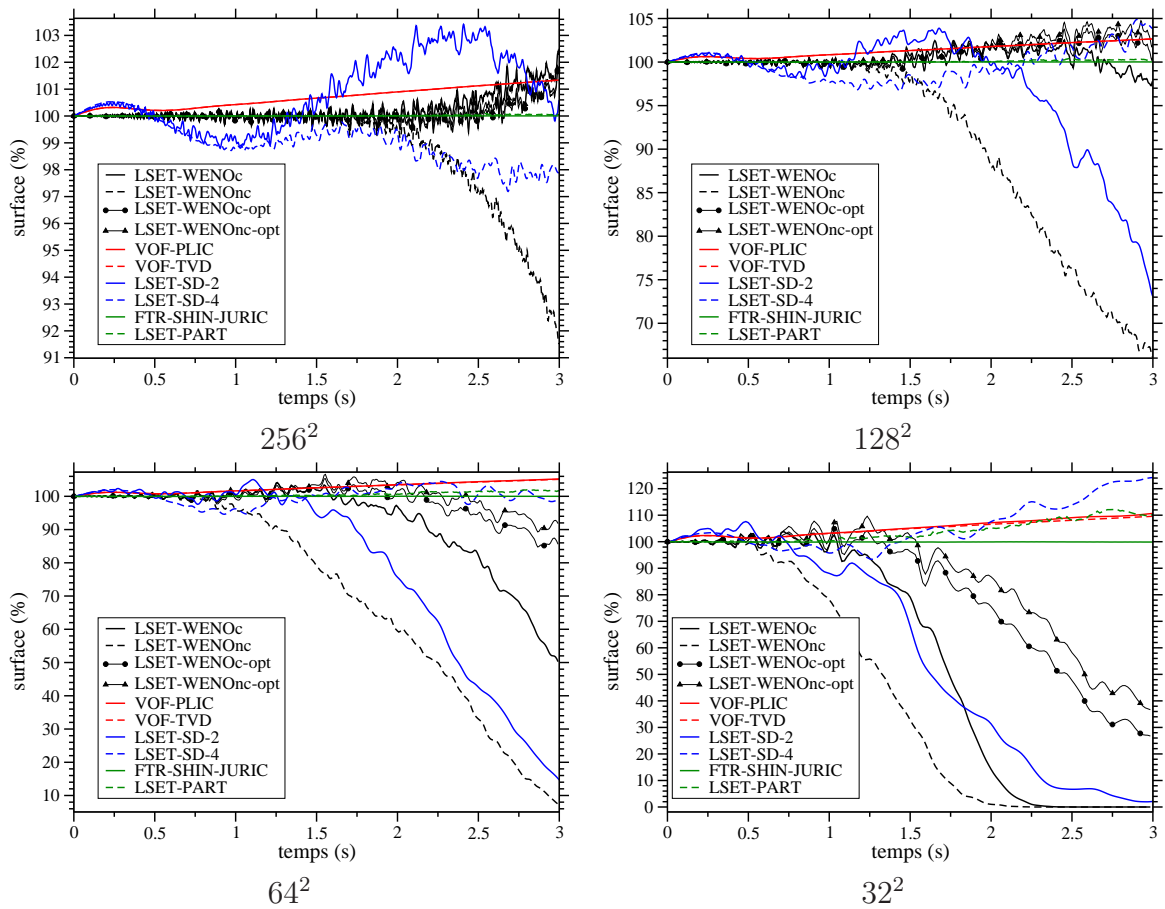


FIGURE 5.12 – Evolution temporelle de la masse du serpent pour différentes tailles de grilles et différentes méthodes de capture d'interface.

conservation de la masse est encore améliorée. Les méthodes VOF sont très précises quant à la conservation de la masse (moins de 10 % d'écart par rapport à la masse initiale sur un maillage 32^2). Une remarque peut être faite quant au VOF-TVD. La figure 5.11 indique la perte du serpent in alors que la figure 5.12 montre que la perte de masse du serpent in est inférieure à 10 %. Ceci peut sembler contradictoire. En fait, non. Les méthodes VOF sont intrinsèquement conservatives pour la masse, mais sur un maillage 32^2 , l'interface a diffusé sur plusieurs mailles de telle sorte qu'il n'est pas possible d'identifier l'iso-fonction couleur $C = 0.5$. Pour les méthodes LSET-SD, le 4^{ème} ordre est plus précis que les méthodes LSET-WENO classiques pour des résolutions faibles (64^2 et 32^2). Les méthodes couplées à des marqueurs lagrangiens garantissent une conservation de la masse supérieure à 90 % dans la configuration la plus défavorable (32^2). La méthode FTR-SHIN-JURIC est la méthode la plus précise quant à la conservation de la masse.

5.3 Conclusions sur les méthodes de suivi d'interface

Une interface évoluant dans un environnement turbulent est soumise à de fortes déformations (étirement, formation de ligaments, rupture). Les courbures locales (et leurs variations) peuvent être importantes. Même avec un maillage adapté, la sous-résolution spatiale peut apparaître dans des zones ligamentaires par exemple. Les deux cas tests présentés dans les sections précédentes nous ont permis de valider chacune des méthodes de suivi d'interface face aux effets de sous-résolution (cas test du serpent in) et dans des configurations à fort gradients de courbure (coins dans le disque de Zalesak).

Les méthodes LSET-WENO sont dissipatives, surtout dans les zones où la courbure est forte (coins du disque). La version conservative améliore cette caractéristique. Lorsque les poids dans les schémas WENO sont calculés de façon optimale, la dissipation diminue quantitativement. La précision augmente aussi (par exemple, le tête du serpent in est remarquablement bien résolue avec la méthode LSET-WENO-opt). Mais le problème majeur des méthodes level-set reste la perte de masse. Encore une fois, l'utilisation optimale des poids WENO permet d'améliorer sensiblement cette perte de masse.

On ne rencontre pas ce problème avec les méthodes VOF qui conservent intrinsèquement la masse. Mais la localisation précise de l'interface peut poser problème, surtout à faible résolution. En effet, l'interface est diffusée sur plusieurs mailles, ce qui peut entraîner l'impossibilité de localiser exactement l'interface (iso-contour $C = 0.5$), comme par exemple dans le cas test du serpent in pour VOF-TVD sur le maillage 32^2 . Globalement, dans ces deux cas tests, les méthodes VOF apparaissent moins précises que les méthodes level-set. Notamment, on perd rapidement la fente dans le disque de Zalesak avec VOF-TVD. VOF-PLIC est précis pour localiser le serpent in sur toute sa longueur, mais dans les zones de sous résolution le serpent in est fragmenté en chapelets de gouttes souvent plus épaisses que la queue du serpent in. Ces gouttes n'ont pas de justification physiques. Il sera alors difficile de faire la part des choses entre les gouttes réellement physiques (qui résultent d'un déchirement de ligament) et celles purement numériques dues à la résolution (comme présentées dans le cas test du serpent in).

Pour les méthodes SD, à condition que l'ordre soit suffisamment grand, la précision est importante, et notamment dans les coins. Mais, à haute résolution, l'interface reconstruite oscille. Même si la fonction level-set est une fonction très régulière, il faut limiter les schémas

5.3 Conclusions sur les méthodes de suivi d'interface

spectraux pour empêcher ces oscillations. D'ailleurs, à plus faible résolution, lorsque la dissipation numérique est plus forte, les oscillations diminuent et la méthode LSET-SD-4 s'avère très précise (à faible résolution). Cependant, on observe un décalage de l'iso- $\phi = 0$ par rapport à la théorie (cf. cas test du serpent).

Les méthodes qui sont couplées à des marqueurs sont les plus précises pour traiter les fortes courbures. La surrésolution offerte par les 3 marqueurs par maille permet une grande précision dans la localisation de l'interface. Cette surrésolution fait toute la différence dans les cas sous-résolus (ici on parle du maillage eulérien sous-jacent). La méthode FTR-SHIN-JURIC semble moins précise que la méthode LSET-PART. Ceci est dû à l'utilisation d'une équation de Poisson pour reconstruire la fonction couleur à partir des marqueurs et au reseed. Les méthodes couplées à des marqueurs sont attractives. Mais leur principal défaut réside dans la lourdeur de la gestion des particules. Ceci a pour conséquence d'augmenter fortement le temps de calcul de l'interface.

Chapitre 6

Couplage Navier-Stokes/méthode de suivi d'interface : traitement des conditions de saut

Sommaire

6.1	Présentation des techniques de traitement des sauts à l'interface	102
6.1.1	Méthode CSF	102
6.1.2	Méthode ghost-fluid	103
6.1.3	Méthode par application de la première formule de Frenet	106
6.2	Comparaison des solveurs monophasiques entre Thetis et Dyjeat	107
6.2.1	Tourbillon de Taylor-Green	107
6.3	Etude de différents couplages de méthodes de suivi d'interface avec différentes techniques de traitement des sauts à l'interface	108
6.3.1	Quelques remarques à propos des méthodes retenues	108
6.3.2	Cas test de Prosperetti	110
6.3.3	Cas test de la bulle statique : mesure des courants parasites	115
6.3.4	Rupture de barrage sur fond mouillé	118
6.4	Conclusions	120

Dans les chapitres précédents, différentes méthodes de suivi d'interface ont été présentées puis comparées dans le cadre d'une utilisation dans un écoulement turbulent. L'interface est le lieu de discontinuités dues à la présence de la tension de surface et à l'équilibre des forces de déformations visqueuses, résultant des conditions de saut à l'interface sur la pression et la vitesse. A travers l'interface, les propriétés géométriques comme la masse volumique ou la viscosité dynamique sont discontinues. Ainsi, la méthode de suivi d'interface qui permet de localiser l'interface avec précision doit être adaptée à la technique utilisée pour le traitement des sauts précisément à l'interface. Nous allons voir que certaines méthodes de suivi d'interface sont mieux adaptées que d'autres lorsqu'une technique particulière de traitement des sauts est utilisée. Ainsi, la méthode de suivi d'interface n'est plus considérée de façon isolée, mais bien couplée avec les équations de Navier-Stokes qui intègrent les sauts à l'interface.

Dans un premier temps, nous allons exposer trois techniques de traitement des conditions de saut à l'interface : la technique CSF, la technique ghost-fluid et la méthode de Frénet. Dans

ce chapitre, nous utiliserons deux codes différents. Le premier, Thetis, traite les conditions de saut par la méthode CSF. Thetis sera utilisé pour les simulations avec les techniques VOF ou encore de front-tracking de Shin et Juric. Le deuxième code, Dyjeat, a développé la méthode ghost-fluid. Dyjeat est utilisé pour les simulations avec level-set. Comme deux codes différents sont utilisés, les solveurs monophasiques doivent être comparés. Ainsi, les différences liées à l'aspect diphasique (méthode de capture d'interface et traitements des termes capillaires) pourront être évaluées indépendamment des erreurs propres à chaque code pour traiter ce qui ne relève pas de l'aspect diphasique (découplage pression/vitesse, traitement du terme convectif, etc ...). Enfin, les méthodes de suivi d'interface seront couplées à une technique de traitement des sauts. Une comparaison sera menée.

6.1 Présentation des techniques de traitement des sauts à l'interface

6.1.1 Méthode CSF

La méthode CSF (Continuum Surface Force) a été développée par Brackbill *et al.* [17]. C'est une ouverture de la méthode IBM (Immersed Boundary Method) de Peskin [106] initialement proposée pour la simulation des écoulements de sang dans le cœur. La méthode de Peskin [106] s'appuie sur la régularisation d'une force surfacique par une formulation volumique qui approche la formulation surfacique initiale. C'est donc une méthode développée pour une approche eulérienne de l'interface. En effet, les points de discrétisation du maillage ne coïncident pas exactement avec l'interface, d'où la nécessité de régulariser la force surfacique sur le maillage eulérien. Si Ω est un domaine délimité par la frontière Γ , et si f_s est une force surfacique qui s'exprime en tout point x_s de l'interface, alors une force volumique f_v peut être définie en tout point x de Ω par :

$$f_v(x) = \int_{\Gamma} f_s(x) \delta(x - x_s) d\Gamma$$

où δ est la fonction de Dirac. Ainsi, on a :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} f_v(x) d\Omega &= \int_{\Omega} \left(\int_{\Gamma} f_s(x) \delta(x - x_s) d\Gamma \right) d\Omega \\ &= \int_{\Gamma} f_s(x) \left(\int_{\Omega} \delta(x - x_s) d\Omega \right) d\Gamma \\ &= \int_{\Gamma} f_s(x) d\Gamma \end{aligned}$$

Avec la méthode CSF, Brackbill [17] utilise ce principe pour traiter numériquement la tension de surface dans les équations de Navier-Stokes. En effet, la force de tension de surface est une force surfacique dont le point d'application est l'interface elle-même. La méthode CSF conduit donc à une régularisation en volume de la tension de surface. On aboutit à :

$$\int_{\Gamma} \sigma \kappa \mathbf{n} d\Gamma = \int_{\Omega} \sigma \kappa \delta \mathbf{n} d\Omega \quad (6.1)$$

Ainsi les forces de tension de surface apparaissent comme un terme volumique qui agit comme un terme source dans les équations de Navier-Stokes, au même titre que les termes visqueux par exemple. L'inconvénient avec la régularisation en volume, c'est que les discontinuités sont lissées sur quelques mailles autour de l'interface. Ainsi, la solution numérique s'éloigne de la solution physique simplement à cause de la modélisation retenue pour le terme de tension de surface.

6.1.2 Méthode ghost-fluid

Afin de garder une description précise de la tension de surface, d'autres méthodes traitent directement les conditions de saut à l'interface sans régularisation volumique. On peut citer la méthode IIM (Immersed Interface Method) et la méthode ghost-fluid (GFM). Avec la méthode IIM [75, 76, 78], les sauts sont injectés à l'intérieur d'un stencil de discrétisation. Ainsi, les sauts de la solution et de sa dérivée sont préservés à l'interface. La méthode IIM est très précise (second ordre) mais sa mise en œuvre est complexe. En plus, lorsqu'on applique la méthode IIM pour résoudre l'équation de Poisson pour la pression, la matrice n'est pas symétrique, ce qui complique son inversion par les solveurs classiques.

La méthode ghost-fluid [36] est une simplification et une symétrisation de la méthode IIM. La description mathématique complète de la méthode ghost-fluid est proposée dans la thèse de F. Couderc [26]. Au départ, la méthode ghost-fluid a été mise au point pour traiter les discontinuités de contact dans le contexte des équations d'Euler (non visqueuses). La méthode a été généralisée aux chocs, détonations, déflagrations dans [37], et aux écoulements visqueux compressibles dans [38]. La méthode ghost-fluid généralisée capture les conditions de saut de Rankine-Hugoniot appropriées à l'interface et intègre ces conditions de saut de façon explicite dans la discrétisation numérique. Un fluide artificiel (le fameux ghost fluid) est créé. Ce fluide intègre les sauts à l'interface. Une approche similaire de capture de la condition limite est utilisée pour résoudre l'équation de Poisson pour le champ de pression [83]. Comme montré dans [58], la méthode ghost-fluid peut être utilisée pour modéliser les équations de Navier-Stokes directement, sans rajouter de termes sources volumiques aux équations de Navier-Stokes qui modéliseraient l'effet de la tension de surface.

Nous nous proposons d'exposer la méthode ghost-fluid en 1D. Encore une fois, nous renvoyons le lecteur à la thèse de F. Couderc [26] où le problème 2D est détaillé. On considère un domaine Ω divisé en deux sous-domaines Ω^+ et Ω^- séparés par une frontière Γ . On se propose de résoudre le problème général suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dx} \left(\beta(x) \frac{d}{dx} u(x) \right) = f(x) \quad x \in \Omega \\ [u]_{\Gamma} = u^+ - u^- = a(x) \quad x \in \Gamma \\ \left[\beta(x) \frac{d}{dx} u(x) \right]_{\Gamma} = \left(\beta \frac{du}{dx} \right)^+ - \left(\beta \frac{du}{dx} \right)^- = b(x) \quad x \in \Gamma \end{array} \right. \quad (6.2)$$

On s'intéresse à deux configurations. La première où il y a seulement un saut de la solution ($b(x) = 0$). Le deuxième où la solution est continue mais pas de classe C^1 ($a(x) = 0$).

$\mathbf{b}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ et $\mathbf{a}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$ Le système (6.2) pris dans ce cas est à relier à l'étape de solution en pression dans la méthode de projection, à laquelle on y adjoint la condition de saut en

pression (ici, vue comme une condition limite).

$$\begin{cases} \nabla \cdot \left(\frac{\Delta t}{\rho} \nabla p^{n+1} \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^* \\ [p] = 2[\mu](\nabla u \cdot \mathbf{n}, \nabla v \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} + \sigma \kappa \end{cases}$$

Alors, la résolution du système (6.2) dans le cas $b(x) = 0$ et $a(x) \neq 0$ revient à résoudre l'équation de Poisson avec les bonnes conditions aux limites. Une discrétisation standard volumes finis au deuxième ordre de l'équation précédente sur la cellule centrée en x_k de frontières $x_{k-1/2}$ et $x_{k+1/2}$ est donnée par :

$$\frac{\beta_{k+1/2} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \right) - \beta_{k-1/2} \left(\frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_k \quad (6.3)$$

On considère maintenant qu'une interface coupe le domaine entre x_k et x_{k+1} . La solution u entre ces points n'est pas continue à cause du saut représenté ici par $a(x)$. La discrétisation précédente n'est donc plus valable. Exposons maintenant le principe de la méthode ghost-fluid pour proposer une discrétisation de l'équation de Poisson qui prenne en compte le saut à l'interface. Nous nous appuyons sur la figure 6.1 pour fixer les notations. On considère en

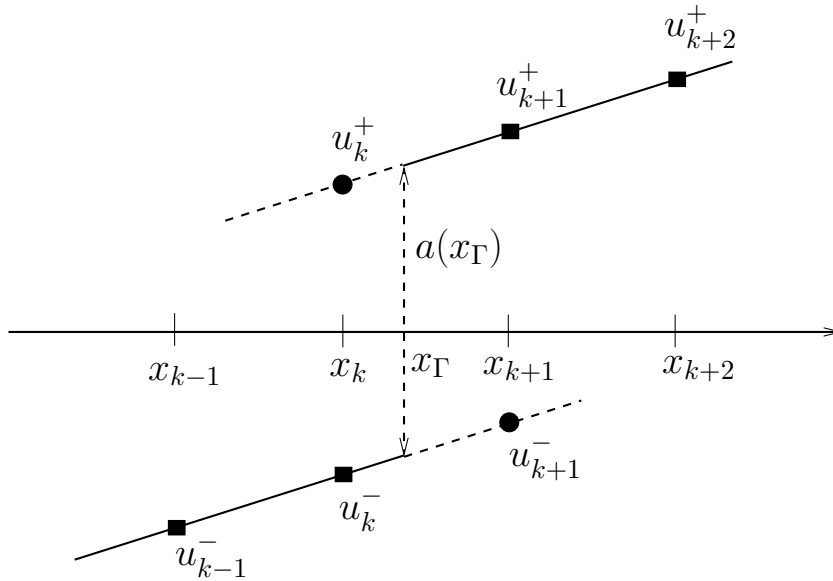


FIGURE 6.1 – Représentation de la solution u discontinue au passage de l'interface Γ . Mise en place du fluide fantôme.

1D deux sous-domaines Ω^+ et Ω^- d'un domaine Ω séparés par une frontière Γ . Sur la figure 6.1, la frontière est située entre les points x_k et x_{k+1} . L'idée de la ghost-fluid est d'utiliser un fluide fantôme qui est une extension par prolongement continu du fluide réel à travers l'interface. De part et d'autre de l'interface, on a les valeurs réelles de la solution $u_k^- \in \Omega^-$ et $u_{k+1}^+ \in \Omega^+$. On cherche alors les valeurs fantômes $u_k^+ \in \Omega^+$ et $u_{k+1}^- \in \Omega^-$ qui soient les prolongements continus de la solution réelle à travers l'interface. Pour ce faire, on choisit :

$$\begin{cases} u_k^+ = u_k^- + a(x_\Gamma) \\ u_{k+1}^- = u_{k+1}^+ - a(x_\Gamma) \end{cases} \quad (6.4)$$

6.1 Présentation des techniques de traitement des sauts à l'interface

La discrétisation de l'équation de Poisson du côté $-$ peut alors se réécrire :

$$\frac{\beta_{k+1/2} \left(\frac{u_{k+1}^- - u_k^-}{\Delta x} \right) - \beta_{k-1/2} \left(\frac{u_k^- - u_{k-1}^-}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_k \quad (6.5)$$

qui se réécrit, en utilisant (6.4) :

$$\frac{\beta_{k+1/2} \left(\frac{u_{k+1} - a(x_\Gamma) - u_k}{\Delta x} \right) - \beta_{k-1/2} \left(\frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_k \quad (6.6)$$

$$\frac{\beta_{k+1/2} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \right) - \beta_{k-1/2} \left(\frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_k + \frac{a(x_\Gamma)}{\Delta x^2} \beta_{k+1/2} \quad (6.7)$$

On retrouve ainsi la discrétisation initiale. Une formule identique est obtenue pour le côté $+$. Seul un terme supplémentaire qui contient le saut à l'interface est rajouté au second membre de l'équation de Poisson à résoudre. Ceci fait le charme de la méthode ghost-fluid puisque les solveurs développés pour résoudre les écoulements monophasiques peuvent être utilisés dans le cas diphasique. Notamment, la matrice à inverser reste la même et symétrique. Il reste à évaluer le saut $a(x_\Gamma)$ juste sur l'interface. Pour ce faire, nous avons utilisé différentes techniques. Soit une extrapolation à partir des sauts calculés aux centres des cellules eulériennes (grâce à la fonction level-set). Soit par calcul direct grâce à des particules sur l'interface.

Ainsi, nous avons montré comment, à partir de la méthode ghost-fluid, le saut à l'interface peut être pris en compte directement dans la discrétisation numérique de l'équation de Poisson, sans formulation volumique des forces de tension de surface.

$\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ et $\mathbf{b}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$ Cette fois, la solution u est continue à la traversée de l'interface mais pas de classe C^1 (rupture de pente). Cette configuration est à rattacher concrètement au calcul des termes visqueux $\frac{\mu}{\rho} (\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u})$. En effet, à la traversée de l'interface, le saut dans la direction tangentielle du tenseur des contraintes donne $\mathbf{t} \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u})] \cdot \mathbf{n} = 0$. La dérivée de la vitesse n'est donc pas continue au passage de l'interface.

La condition de saut $[\beta(x) \frac{d}{dx} u(x)]_\Gamma = (\beta \frac{du}{dx})^+ - (\beta \frac{du}{dx})^- = b(x)$ peut être discrétisée de la façon suivante :

$$\beta_{k+1} \left(\frac{u_{k+1} - u_I}{(1-\theta)\Delta x} \right) - \beta_k \left(\frac{u_I - u_k}{\theta\Delta x} \right) = b(x_\Gamma)$$

où la figure 6.2 fixe les notations. Ceci nous permet d'exprimer u_I en fonction des valeurs de u définies sur le maillage eulérien.

$$u_I = \frac{\beta_{k+1} u_{k+1} \theta + \beta_k u_k (1-\theta) - b(x_\Gamma) \theta (1-\theta) \Delta x}{\beta_{k+1} \theta + \beta_k (1-\theta)}$$

Ainsi, la dérivée à gauche de u calculée en x_Γ est donnée par :

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_\Gamma^-} \approx \frac{u_I - u_k}{\theta \Delta x} = \frac{\beta_{k+1}}{\beta_{k+1} \theta + \beta_k (1-\theta)} \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} - \frac{b(x_\Gamma) (1-\theta)}{\beta_{k+1} \theta + \beta_k (1-\theta)}$$

On a une formule analogue pour la dérivée à droite. Et donc la dérivée s'exprime en fonction des variables définies sur le maillage eulérien.

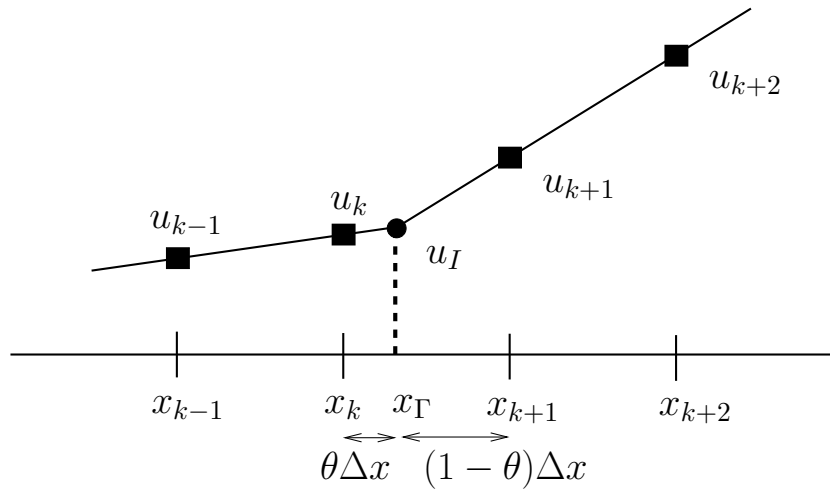


FIGURE 6.2 – Représentation de la solution u continue au passage de l'interface Γ , mais de dérivée discontinue.

6.1.3 Méthode par application de la première formule de Frenet

Lorsque l'interface est représentée par une chaîne connectée de marqueurs, un traitement direct de la tension de surface est possible [113]. On considère un volume de contrôle (une maille) Ω interceptée en deux points A et B par l'interface (cf Fig. 6.3). Alors la force de

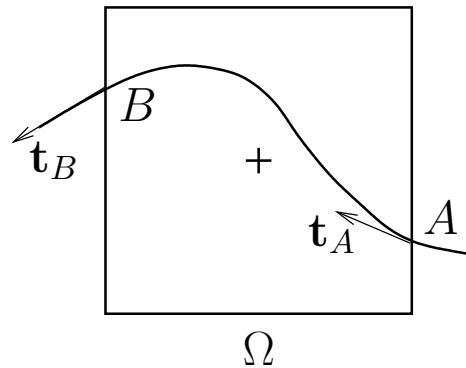


FIGURE 6.3 – Principe de la méthode de Frenet pour le calcul de la tension de surface à partir des tangentes \mathbf{t}_A et \mathbf{t}_B .

tension de surface peut se réécrire :

$$\int_{\Omega} \sigma \kappa \delta_s \mathbf{n} dV = \sigma \oint_A^B \kappa \mathbf{n} ds$$

L'utilisation de la première formule de Frenet pour les courbes paramétriques permet d'écrire :

$$\sigma \oint_A^B \kappa \mathbf{n} ds = \sigma \oint_A^B d\mathbf{t} = \sigma(\mathbf{t}_B - \mathbf{t}_A)$$

où \mathbf{t} est la tangente à l'interface, unitaire et orientée. On retrouve ici la formulation initiale de la force de tension de surface qui est une force tangentielle. Il faut alors appliquer un algorithme pour déterminer les points d'intersection de l'interface avec les frontières des mailles de calcul traversées par l'interface. Cette technique de calcul des forces interfaciales est une méthode lagrangienne.

6.2 Comparaison des solveurs monophasiques entre Thetis et Dyjeat

Dans ce chapitre, deux codes sont utilisés : Dyjeat, initialement développé par Jean-Luc Estivalezes et Frédéric Couderc à l'ONERA. Et Thetis, développé par l'équipe de Jean-Paul Caltagirone au TREFLE.

Thetis résout les équations de Navier-Stokes incompressibles. Le découplage vitesse/pression est réalisé grâce à une méthode de lagrangien augmenté. L'équation de quantité de mouvement est discrétisée sous une forme implicite, ce qui donne une matrice à inverser. Cette matrice n'est pas symétrique. Les problèmes d'algèbre linéaire sont donc résolus par une méthode itérative de gradients bi-conjugués Bi-CGSTAB (Bi-Conjugate Gradient Stabilized) [31] préconditionnée par une méthode LU pour augmenter les vitesses de convergence du solveur. Les termes non linéaires convectifs sont discrétisés par un schéma centré du second ordre ou par un schéma hybride qui s'adapte aux caractéristiques locales de l'écoulement. La discrétisation temporelle est réalisée grâce à des schémas d'Euler du premier ou du second ordre (schéma GEAR).

Dyjeat résout également les équations de Navier-Stokes incompressibles. Le découplage vitesse/pression est réalisé par une méthode classique de projection. Les équations sont discrétisées sous une forme totalement explicite, ce qui peut être contraignant vis-à-vis du pas de temps. La résolution de l'équation de Poisson pour la pression nécessite l'inversion d'une matrice symétrique. Cette inversion est menée à bien par une méthode de gradient conjugué préconditionné par une méthode multigrille [145, 151]. Les termes non linéaires sont discrétisés par des schémas WENO du 5^{ème} ordre. Ces schémas ont largement été développés dans un chapitre précédent consacré à la discrétisation des termes spatiaux dans l'équation d'advection de la level-set. La discrétisation temporelle est un Runge-Kutta d'ordre 3.

Nous nous proposons de comparer ces codes sur le cas test monophasique du tourbillon de Taylor-Green.

6.2.1 Tourbillon de Taylor-Green

Le tourbillon de Taylor 2D est étudié dans le cas non visqueux. Dans une boîte périodique cubique de coté $[0, 2\pi]$, on place un tourbillon caractérisé par le champ de vitesses initial suivant :

$$\begin{cases} u(x, y) = \sin(x) \cos(y) \\ v(x, y) = -\cos(x) \sin(y) \end{cases}$$

La dissipation numérique est mesurée. La perte d'énergie cinétique au bout de 11 s est mesurée. En théorie, l'énergie cinétique doit rester constante et égale à π^2 en l'absence de dissipation visqueuse. La table 6.1 représente les erreurs en norme L^2 ainsi que l'ordre de

convergence. Dans le cas de Dyjeat, les schémas WENO sous leur formes conservative et non conservative sont comparés. A faible résolution, Dyjeat semble plus précis sur ce cas

maillage	Dyjeat WENOc		Dyjeat WENOnC		Thetis	
	erreur L^2	ordre	erreur L^2	ordre	erreur L^2	ordre
32^2	$4.54 \cdot 10^{-4}$	2.06	$4.61 \cdot 10^{-4}$	2.07	$6.75 \cdot 10^{-4}$	2.26
64^2	$1.09 \cdot 10^{-4}$	2.01	$1.09 \cdot 10^{-4}$	2.01	$1.41 \cdot 10^{-4}$	1.87
128^2	$2.72 \cdot 10^{-5}$	2	$2.72 \cdot 10^{-5}$	2	$3.86 \cdot 10^{-5}$	2.44
256^2	$6.79 \cdot 10^{-6}$	2	$6.79 \cdot 10^{-6}$	2	$7.13 \cdot 10^{-6}$	2.13
512^2	$1.70 \cdot 10^{-6}$	-	$1.70 \cdot 10^{-6}$	-	$1.63 \cdot 10^{-6}$	-

TABLE 6.1 – Erreurs en norme L^2 et ordres associés pour le cas test de Green-Taylor.

test en particulier. Mais l'erreur reste du même ordre de grandeur entre les deux codes. En revanche, à haute résolution (à partir de 256^2), les erreurs sont comparables entre les deux codes. L'ordre de convergence est de 2 pour les deux codes. On ne dénote pas pour ce cas test de différences notables entre les deux solveurs monophasiques. Ainsi, lors des comparaisons entre les différentes méthodes de résolution des équations de Navier-Stokes proposées dans la suite, les différences ne relèveront pas du solveur monophasique qui est différent entre Dyjeat et Thetis. Ce sont réellement les différentes méthodes de capture d'interface couplées aux différentes techniques de traitement des sauts à l'interface qui seront comparées.

6.3 Etude de différents couplages de méthodes de suivi d'interface avec différentes techniques de traitement des sauts à l'interface

Dans cette partie, nous nous proposons de coupler les techniques de suivi d'interface présentées dans les chapitres précédents avec les différentes méthodes de traitement des forces de tension de surface. Nous utilisons deux codes différents et les techniques de suivi d'interface et de calcul des forces interfaciales n'ont pas toutes été développées par les deux codes. Toutes les combinaisons possibles n'ont donc pas pu être testées. Voici résumées dans le tableau 6.2, les combinaisons retenues ainsi que les abréviations correspondantes. Voir le tableau 5.1 page 80 pour les abréviations des méthodes de suivi d'interface.

6.3.1 Quelques remarques à propos des méthodes retenues

Pour les méthodes LSET-WENO, les schémas WENO conservatifs sont utilisés aussi bien pour la discrétisation spatiale du terme convectif non linéaire des équations de Navier-Stokes, que pour la discrétisation du terme convectif dans l'équation pour la level-set. Dans la thèse de F. Couderc [26], il est montré que la forme conservative des schémas WENO améliore considérablement les problèmes de diffusion numérique. C'est la forme conservative des schémas WENO qui sera utilisée dans la suite de ce travail. Pour limiter les effets de la redistance, une seule itération sur la redistance est effectuée. La formulation optimale des poids des WENO sera comparée à la formulation pondérée. Pour les méthodes LSET-SD, nous n'avons retenu que le 4^{ème} ordre, aux vues de l'étude précédente sur les méthodes de

6.3 Etude de différents couplages de méthodes de suivi d'interface avec différentes techniques de traitement des sauts à l'interface

Méthode	abréviation
Méthode LSET-WENOc avec méthode ghost-fluid pour les forces de tension de surface	LSET-WENOc/GFM
Méthode LSET-WENOc-opt avec méthode ghost-fluid pour les forces de tension de surface	LSET-WENOc-opt/GFM
Méthode VOF-PLIC avec méthode CSF pour les forces de tension de surface	VOF-PLIC/CSF
Méthode VOF-TVD avec méthode CSF pour les forces de tension de surface	VOF-TVD/CSF
Méthode LSET-SD-4 avec méthode ghost-fluid pour les forces de tension de surface	LSET-SD-4/GFM
Méthode FTR-SHIN-JURIC avec méthode de Frenet pour les forces de tension de surface	FTR-SHIN-JURIC/FRENET
Méthode LSET-PART avec méthode ghost-fluid pour les forces de tension de surface	LSET-PART/GFM

TABLE 6.2 – Récapitulatif des méthodes de suivi d'interface utilisées avec leur abréviation.

suivi d'interface où le deuxième ordre s'est avéré insuffisamment précis. On donne quelques explications sur la méthode LSET-PART/GFM pour éclaircir à quel niveau le couplage entre la level-set et les marqueurs va intervenir lors de l'application de la méthode ghost-fluid. Lors de l'utilisation de la méthode LSET-PART/GFM, le saut de pression à l'interface $[p]_\Gamma$ est décomposé ainsi : $[p]_\Gamma = [p]_{\Gamma,cap} + [p]_{\Gamma,visc}$ avec :

$$\begin{cases} [p]_{\Gamma,cap} = \sigma \kappa \\ [p]_{\Gamma,visc} = [2\mu]_\Gamma (\nabla u \cdot \mathbf{n}, \nabla v \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} \end{cases}$$

Grâce aux marqueurs, la courbure est connue exactement sur l'interface avec une grande précision. La figure 6.4 illustre comment la contribution $[p]_{\Gamma,cap}$ du saut à l'interface est calculée grâce aux marqueurs. Sur cette figure, l'interface coupe les cellules (i, j) et $(i + 1, j)$. Alors $[p]_{\Gamma,cap}$ est calculé de cette façon :

$$[p]_{\Gamma,cap} = \frac{1}{card(\mathcal{P})} \sum_{p \in \mathcal{P}} \sigma \kappa_p \quad (6.8)$$

où \mathcal{P} désigne l'ensemble des particules contenues dans les cellules (i, j) et $(i + 1, j)$. Cette moyenne est nécessaire pour éviter l'apparition d'instabilités, notamment lors de la simulation des courants parasites. La raison sous-jacente à ses instabilités tient à la description sous-maille de la courbure. Cette question a été soulevée par Desjardins [34] et Herrmann [49]. Les instabilités proviendraient de la non conformité entre le champ de vitesse décrit sur la maillage eulérien et la description sous-maille de la courbure. Il est apparu que la moyenne présentée dans l'équation (6.8) est nécessaire pour stabiliser le calcul du saut à l'interface. Pour le calcul de $[p]_{\Gamma,visc}$, l'extrapolation des gradients de vitesse sur l'interface est nécessaire. Cette extrapolation est rendue possible par l'utilisation de la fonction level-set ϕ . Par exemple, en 1D, si l'interface Γ passe entre les points i et $i + 1$, alors l'extrapolation

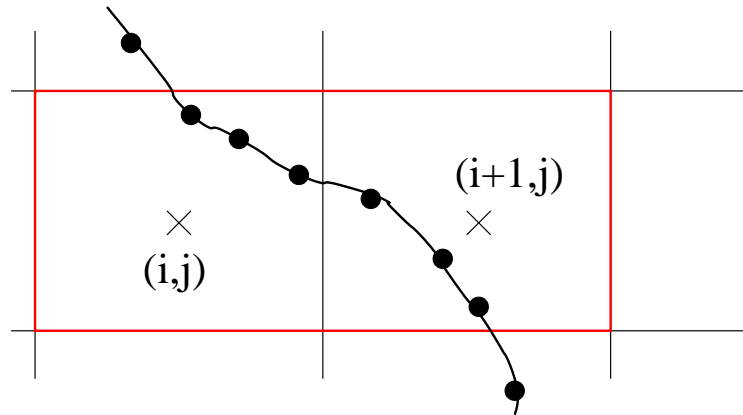


FIGURE 6.4 – Configuration du calcul du saut normal à l'interface. Les courbures locales données par les marqueurs dans les cellules (i, j) et $(i + 1, j)$ sont moyennées pour le calcul du saut.

d'une grandeur A sur l'interface est donnée par :

$$A_{\Gamma} = \frac{A_i |\phi_{i+1}| + A_{i+1} |\phi_i|}{|\phi_{i+1}| + |\phi_i|}$$

Nous nous proposons maintenant de tester les méthodes énumérées sur la figure 6.2 sur différents cas tests de la littérature.

6.3.2 Cas test de Prosperetti

L'étude de l'oscillation capillaire d'une onde de surface séparant deux fluides visqueux de densités différentes est étudiée. La gravité est nulle et la surface initialement déformée oscille sous l'effet de la force de rappel de tension de surface. L'oscillation est amortie par la viscosité. L'amplitude initiale de l'interface est donnée par :

$$a(x, 0) = a_0 \cos(kx)$$

où k est le nombre d'onde. L'oscillation de l'interface est comparée à la solution proposée par Prosperetti [115] dans le cas où les deux fluides ont la même viscosité cinématique ν :

$$a(t) = \frac{4(1 - 4\beta)\nu^2 k^4}{8(1 - 4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2} a_0 \operatorname{erfc}(\nu k^2 t)^{1/2} + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \left(\frac{\omega_0^2 a_0}{z_i^2 - \nu k^2} \right) \exp((z_i^2 - \nu k^2)t) \operatorname{erfc}(z_i t^{1/t})$$

où les z_i sont les quatre racines de l'équation suivante :

$$z^4 - 4\beta(k^2\nu)^{1/2} z^3 + 2(1 - 6\beta)k^2\nu z^2 + 4(1 - 3\beta)(k^2\nu)^{3/2} z + (1 - 4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2 = 0$$

Les Z_i sont données par $Z_1 = (z_2 - z_1)(z_3 - z_1)(z_4 - z_1)$ avec une permutation circulaire sur les indices pour Z_2, Z_3 et Z_4 . ω_0 est donné par $\omega_0 = \sigma k / (\rho_1 + \rho_2)$ et β par $\beta = \rho_1 \rho_2 / (\rho_1 + \rho_2)^2$.

6.3 Etude de différents couplages de méthodes de suivi d'interface avec différentes techniques de traitement des sauts à l'interface

Le domaine de simulation est un cube de côté L_b avec des conditions limites horizontales périodiques et de glissement pour les parois verticales. Le rapport de densité est noté ρ_1/ρ_2 , le coefficient de tension de surface σ et les deux fluides ont la même viscosité cinématique ν . Les paramètres sont regroupés dans la table suivante. Il est à noter que le saut de 1000 pour la densité est rarement présenté par les auteurs.

$$\left\{ \begin{array}{l} L_b = 2\pi \\ k = 1 \\ a_0 = 0.02 L_b \\ \sigma = 0.1 \\ \nu = 10^{-3} \\ \rho_1/\rho_2 = 1000 \end{array} \right.$$

Le cas test de Prosperetti est plus dévoué à l'étude du traitement des effets capillaires qu'à celle de la méthode de suivi d'interface. En effet, l'interface se déforme peu et reste régulière avec des courbures modérées. D'après les chapitres précédents, toutes les méthodes de suivi d'interface ont une précision similaire pour décrire une interface avec une topologie non raide. Ce qui est intéressant de voir ici, c'est véritablement le couplage entre la méthode de capture d'interface et le traitement numérique des conditions de saut.

Pour le cas test de Prosperetti, la méthode FTR-SHIN-JURIC/FRENET n'est pas présentée. En effet, cette configuration se prête très mal à une condition limite périodique. La figure 6.5 représente l'initialisation des marqueurs à $t = 0$. Bien que les conditions limites gauche et droite soient périodiques, l'interface doit être fermée, ce qui explique la configuration des marqueurs sur la figure 6.5. On voit apparaître quatre zones de très fortes courbures où les forces de tension de surface sont localement très importantes. Ces zones sont le siège de sur-vitesses qui déforment localement l'interface dans ces régions. Les déformations se propagent de proche en proche et finissent par contaminer toute la surface. Nous avons essayé de mettre plusieurs périodes selon l'axe horizontal (jusqu'à 10 périodes) : la contamination de toute l'interface est seulement retardée. C'est pourquoi, nous avons décidé de ne pas valider la méthode FTR-SHIN-JURIC/FRENET sur le cas test de Prosperetti.

Les résultats de l'oscillation capillaire sont présentés sur la figure 6.6. Sur la table 6.3 sont regroupées les erreurs en norme L_1 par rapport à la solution théorique avec les ordres associés.

Il semble que deux grands groupes se distinguent : les méthodes où la tension de surface est prise en compte par la technique CSF, et celles où les sauts à l'interface sont calculés par la méthode ghost-fluid. Globalement, toutes les méthodes sont très précises lorsque la résolution est suffisante (128^2), mais de grosses différences apparaissent pour des résolutions inférieures à 64^2 . Les méthodes VOF/CSF ont tendance à exagérer l'amplitude de l'oscillation. De plus, un déphasage se met en place au cours du temps. La table 6.3 montre que la méthode VOF-TVD/CSF (méthode sans reconstruction géométrique) est plus précise que la méthode VOF-PLIC/CSF (avec reconstruction) : 20 % de gain en moyenne. Les méthodes level-set/GFM sont les plus précises. Pour les configurations les plus sous-résolues (32^2), la période de l'oscillation est bien respectée même si l'amplitude de l'oscillation est amortie (dissipation des méthodes). Pour les méthodes LSET/GFM, la technique avec laquelle la level-set est transportée ou reconstruite a très peu d'effet sur la capture de l'oscillation. En effet, il y a environ 10 % d'erreur entre les méthodes qui relèvent de LSET/GFM. A noter que dans les

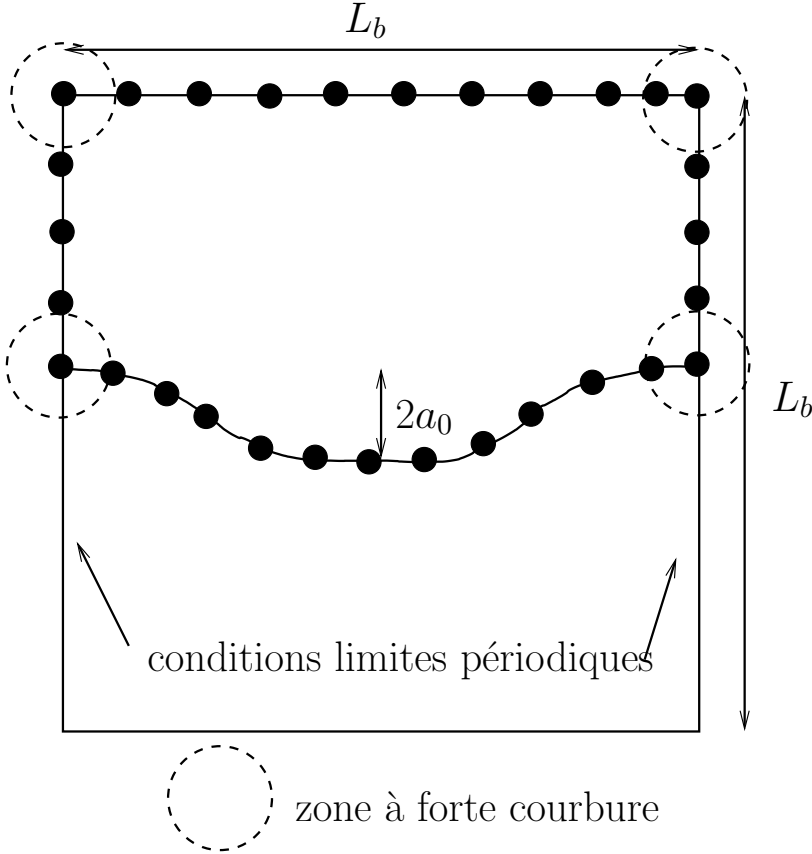


FIGURE 6.5 – Initialisation des marqueurs pour la méthode FTR-SHIN-JURIC/FRENET. Cas test de Prosperetti.

6.3 Etude de différents couplages de méthodes de suivi d'interface avec différentes techniques de traitement des sauts à l'interface

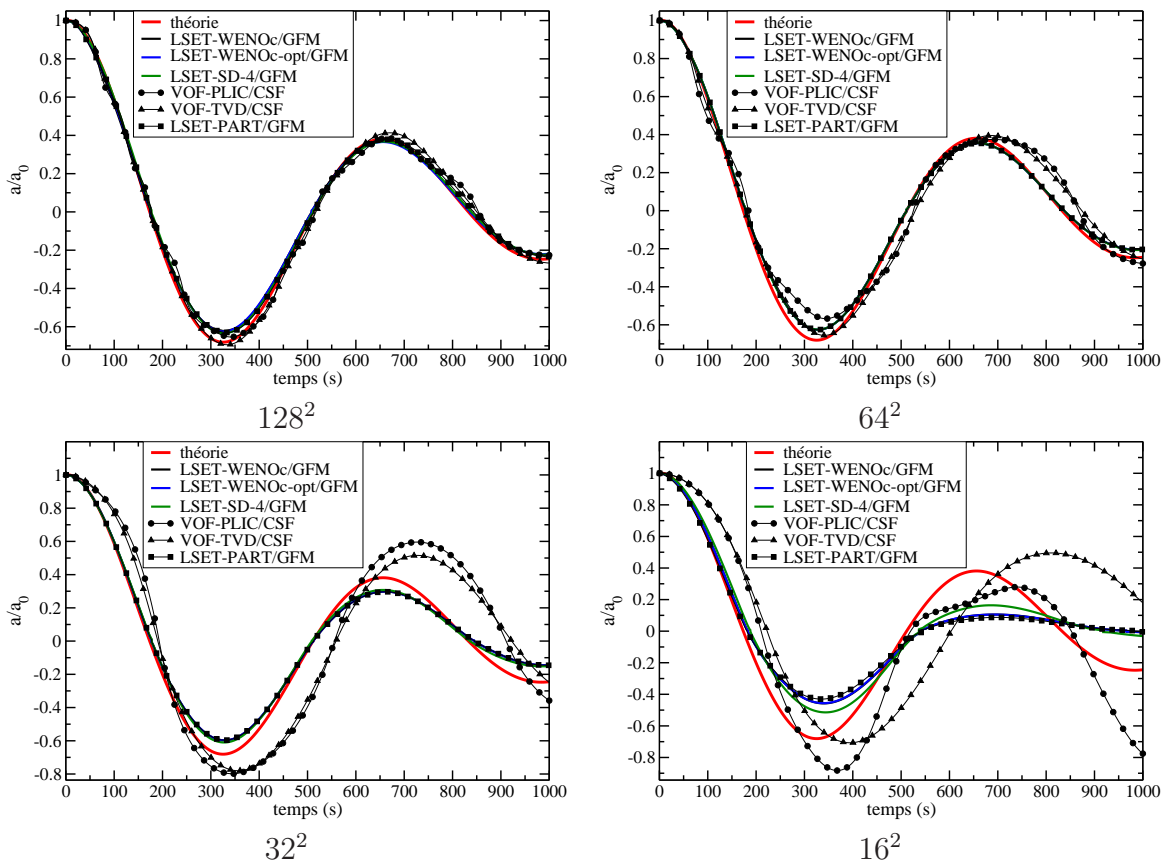


FIGURE 6.6 – Evolution de l'amplitude de l'oscillation capillaire. Cas test de Prosperetti.

méthode	maillage	erreur L_1	ordre
LSET-WENO _c /GFM	128 × 128	2.11 10 ⁻²	-
	64 × 64	2.66 10 ⁻²	0.33
	32 × 32	5.06 10 ⁻²	0.93
	16 × 16	1.39 10 ⁻¹	1.46
LSET-WENO _c -opt/GFM	128 × 128	2.17 10 ⁻²	-
	64 × 64	2.65 10 ⁻²	0.29
	32 × 32	5.04 10 ⁻²	0.93
	16 × 16	1.39 10 ⁻¹	1.47
VOF-PLIC/CSF	128 × 128	2.97 10 ⁻²	-
	64 × 64	6.69 10 ⁻²	1.17
	32 × 32	1.93 10 ⁻¹	1.53
	16 × 16	1.66 10 ⁻¹	-0.21
VOF-TVD/CSF	128 × 128	2.46 10 ⁻²	-
	64 × 64	5.34 10 ⁻²	1.12
	32 × 32	1.67 10 ⁻¹	1.65
	16 × 16	2.97 10 ⁻¹	0.83
LSET-SD-4/GFM	128 × 128	2.03 10 ⁻²	-
	64 × 64	2.63 10 ⁻²	0.38
	32 × 32	4.54 10 ⁻²	0.79
	16 × 16	1.21 10 ⁻¹	1.41
LSET-PART/GFM	128 × 128	1.89 10 ⁻²	-
	64 × 64	2.88 10 ⁻²	0.61
	32 × 32	5.79 10 ⁻²	1.01
	16 × 16	1.52 10 ⁻¹	1.39

TABLE 6.3 – Erreurs en norme L_1 avec ordres associés pour le cas test de Prosperetti.

6.3 Etude de différents couplages de méthodes de suivi d'interface avec différentes techniques de traitement des sauts à l'interface

cas les plus sous-résolus, c'est la méthode LSET-SD-4/GFM qui est la plus précise. Dans ce cas test, pour LSET-PART/GFM, la surrésolution offerte par l'utilisation de particules n'améliore pas les résultats car la configuration de l'interface ne révèle pas de sous-résolutions sévères qui favorisent les techniques couplées à des particules.

D'après la table 6.3, dans les configurations suffisamment résolues qui permettent de capturer correctement l'amplitude et la période de l'oscillation (ici au minimum 64^2), on ne dépasse pas l'ordre 1 pour les méthode GFM, contrairement aux méthodes CSF. Ainsi, les méthodes CSF sont plus précises pour les maillages fortement résolus (au moins 256^2).

Ce cas test a permis de mesurer les capacités de chacune des méthodes à traiter les effets capillaires. Le calcul est piloté ici par les forces de tension de surface qui apparaissent dominantes et dont l'intensité ne décroît qu'à cause des effets visqueux. Dans ce cas-là, les méthodes level-set/ghost-fluid sont les plus efficaces pour les maillages grossiers, tant pour capter une fréquence d'oscillation que pour rendre compte de l'amplitude de l'oscillation. Ce cas test montre les limites de la méthode CSF lorsque le problème devient raide avec un saut de densité fort ($\rho_1/\rho_2 = 1000$) lorsque la résolution n'est pas suffisante.

6.3.3 Cas test de la bulle statique : mesure des courants parasites

Une goutte de rayon R est placée au centre du domaine de calcul de côté L_b . La gravité est nulle. L'interface est circulaire. La solution théorique de ce cas test est la solution de Laplace. En effet, la goutte est en surpression par rapport à l'extérieur. Ceci est dû à la tension de surface σ et à la courbure $\kappa = R^{-1}$ de l'interface. En deux dimensions, le saut de pression est donné par la relation suivante :

$$p_{int} - p_{ext} = \frac{\sigma}{R}$$

Le champ de vitesse initial est nul. C'est pourquoi les termes dus aux contraintes de déformations visqueuses n'apparaissent pas. En théorie, cette solution est stationnaire en l'absence de gravité et aucun champ de vitesse ne doit apparaître. Or l'accumulation des erreurs numériques (erreurs de discrétisation, splitting du saut par direction, extrapolation des sauts à l'interface) crée des vitesses numériques au voisinage de l'interface. Ces vitesses sont appelées les courants parasites [67]. Ce cas test est idéal pour mesurer la bonne convergence des schémas utilisés pour discrétiser les conditions de saut à l'interface. En effet, les effets capillaires sont les termes pilotes dans ce cas test.

Les paramètres numériques retenus pour ce cas test sont résumés dans le tableau suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_b = 0.04 \text{ m} \\ R = 0.01 \text{ m} \\ \rho_{int} = 1000 \text{ kg.m}^{-3} \\ \mu_{int} = 10^{-2} \text{ Pa.s} \\ \rho_{ext} = 1 \text{ kg.m}^{-3} \\ \mu_{ext} = 10^{-4} \text{ Pa.s} \\ \sigma = 0.1 \text{ N.m}^{-1} \end{array} \right.$$

Ces paramètres sont sévères et regroupent les cas les plus défavorables : fort saut de densité, fort coefficient de tension de surface et fortes courbures (goutte de petit rayon). Le nombre

de Laplace de la goutte vaut 20000. On rappelle que le nombre de Laplace La est défini par : $La = 1/Oh^2$ où Oh est le nombre de Ohnesorge lui-même défini par $Oh = \mu / (\sigma \rho D)^{1/2}$. Pour mesurer l'amplitude des courants parasites, on définit un nombre capillaire $Ca_p = \frac{\|\mathbf{u}\|_\infty \mu}{\sigma}$ où $\|\cdot\|_\infty$ est la norme infinie. La figure 6.7 représente l'évolution de Ca_p en fonction du temps adimensionné $\tau_{\text{cour. parasites}} = \frac{t\sigma}{\mu D}$ pour une résolution de 32^2 , ce qui correspond à 16 mailles dans le diamètre de la goutte. Après un certain temps et sauf pour la méthode LSET-SD-

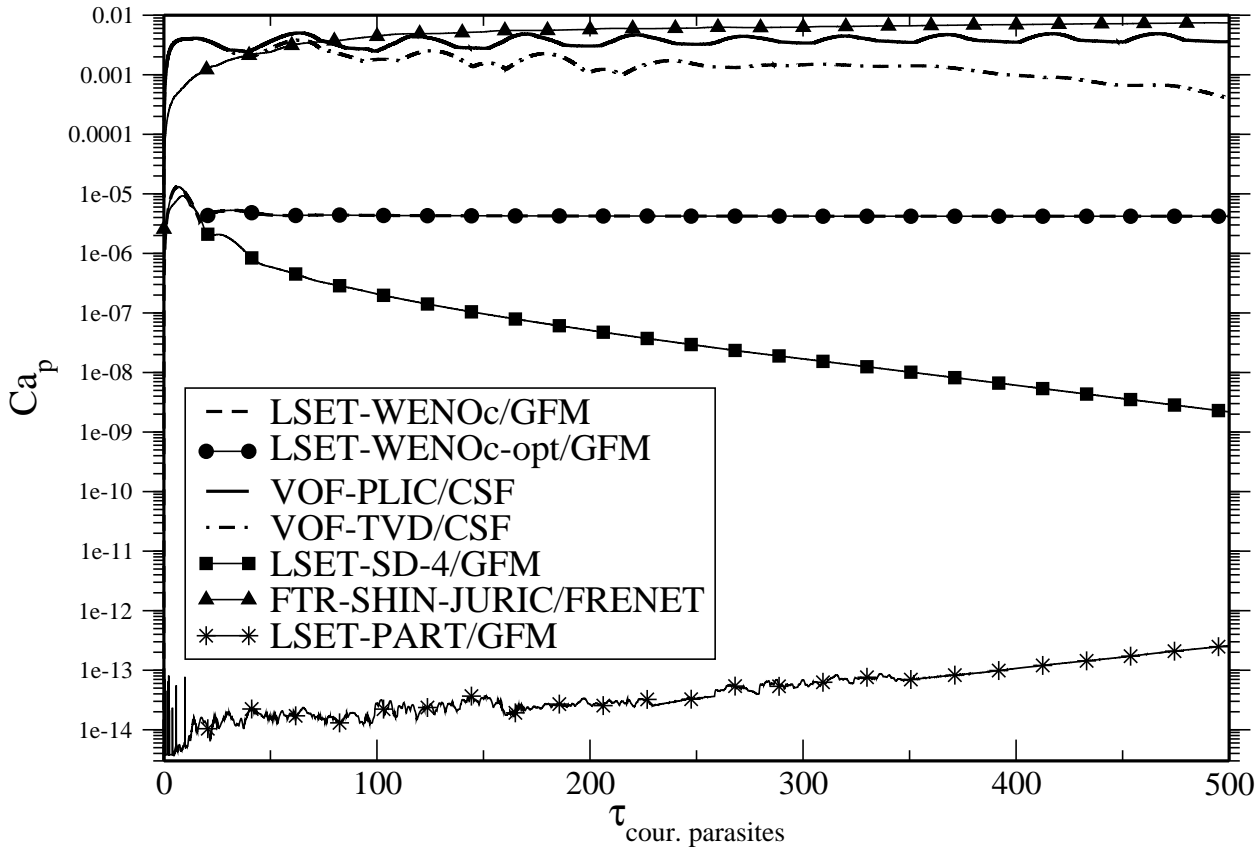


FIGURE 6.7 – Evolution temporelle des courants parasites pour le maillage 32^2 .

4/GFM une asymptote se met en place et les courants parasites deviennent proportionnels à μ/σ . Pour LSET-SD-4/GFM, la valeur de Ca_p continue de décroître pour se stabiliser plus tard. Trois catégories se distinguent clairement.

Les méthodes qui utilisent la fonction couleur (méthodes VOF ou front-tracking de Shin et Juric) induisent les courants parasites les plus forts. VOF-TVD/CSF est plus performante que la version VOF-PLIC. Pour la méthode FTR-SHIN-JURIC/FRENET, l'utilisation de marqueurs n'améliore pas les courants parasites. Dans ce cas test, l'interface est peu déformée et donc la précision lagrangienne des marqueurs ne fait pas la différence. Ce cas test mesure la qualité du schéma de prise en compte des forces de tension de surface. Dans une configuration raide avec fort saut de densité et fort coefficient de tension de surface, la méthode classique CSF est plus précise que la méthode de Frenet.

Viennent ensuite les méthodes level-set/GFM totalement eulériennes où les courants

6.3 Etude de différents couplages de méthodes de suivi d'interface avec différentes techniques de traitement des sauts à l'interface

parasites sont plus modérés. Le cas test de la bulle statique permet donc de montrer l'intérêt de la méthode ghost-fluid. Les sauts sont pris en compte de façon raide sans régularisation. Ceci améliore considérablement le calcul des effets capillaires. Pour la discrétisation des WENO, les versions pondérées et optimales sont strictement identiques ici. La méthode LSET-SD-4/GFM offre une précision supplémentaire. Ceci vient du fait qu'à l'ordre 4, le nombre de degrés de liberté est multiplié par 4 dans chaque direction pour la méthode LSET-SD-4/GFM. La précision des méthodes level-set/GFM purement eulériennes est limitée par la nécessité de l'extrapolation des sauts calculés sur la maillage eulérien vers l'interface.

Enfin, la méthode LSET-PART/GFM où l'amplitude des courants parasites est de l'ordre de la précision machine. La précision est due aux particules qui calculent les sauts liés à la courbure directement sur l'interface, sans aucune extrapolation. Ici, la précision des marqueurs intervient non seulement dans le suivi de l'interface, mais surtout (et c'est ce qui est important dans le cas test de la bulle statique) dans le calcul des paramètres géométriques comme la courbure ou la normale locale à l'interface.

La figure 6.8 montre l'amplitude des courants parasites en fonction de la résolution spatiale de la goutte. Deux types de comportement sont observés. Pour les méthodes level-

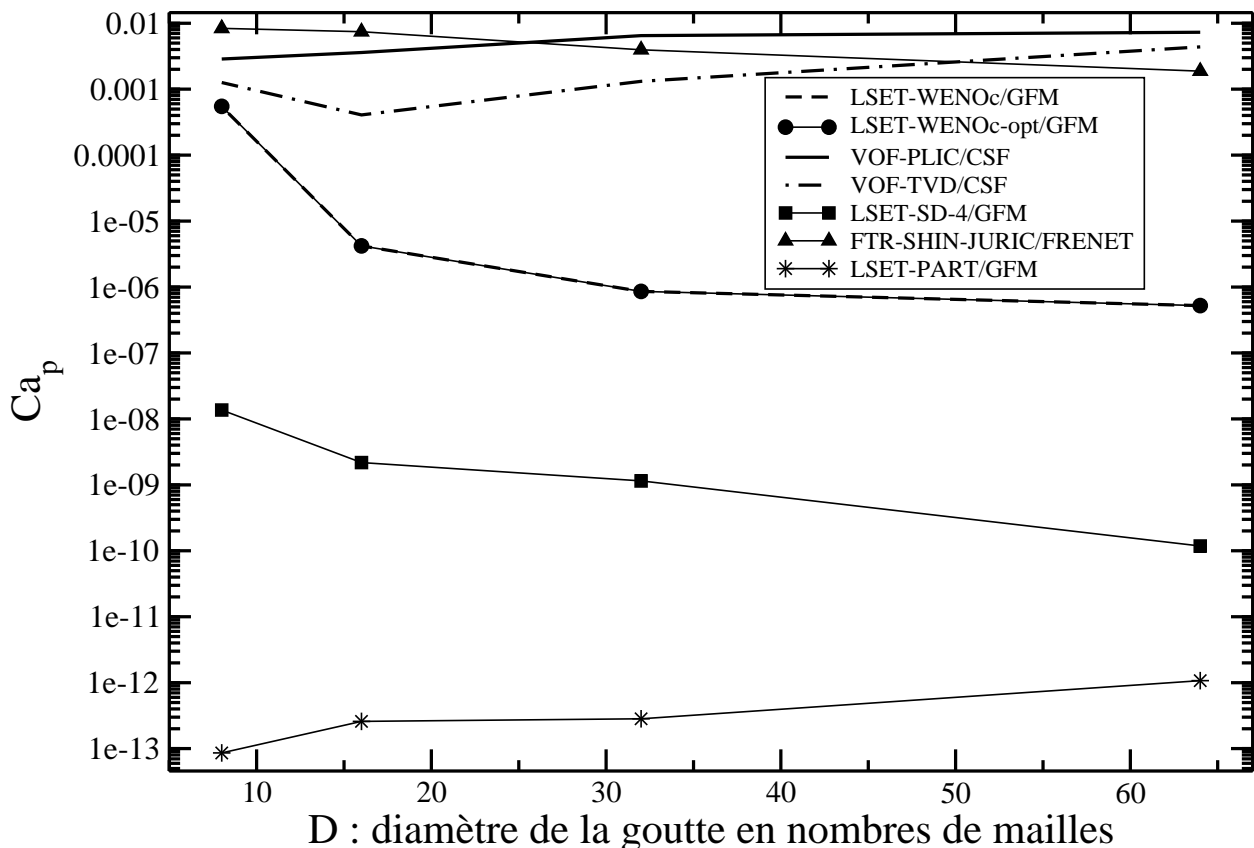


FIGURE 6.8 – Evolution de l'amplitude des courants parasites en fonction de la résolution spatiale. Le diamètre D de la goutte est donné en nombre de mailles.

set/GFM et FTR-SHIN-JURIC/FRENET, les courants parasites diminuent lorsque la résolution spatiale augmente. Il y a donc convergence de la méthode pour les courants parasites. Pour les autres méthodes, l'amplitude des courants parasites semble indépendante de la

résolution spatiale. Ou du moins, leur évolution n'est pas monotone. Pour la méthode LSET-PART/GFM, les courants parasites sont moins forts pour les maillages grossiers. Ceci est à mettre en relation avec ce qui a été dit précédemment à propos de la stabilité de la méthode et du besoin de moyenner la courbure sur plusieurs marqueurs. Pour les maillages faiblement résolus, le support pour le calcul de la courbure moyenne est plus grand, ce qui améliore considérablement la stabilité et, comme le montre la figure 6.8, le calcul des courants parasites.

Le cas test de la bulle statique a permis de classer les méthodes sur une configuration où ce sont les effets capillaires qui dominent avec une interface pratiquement immobile. Grâce à sa vision discontinue des sauts, la méthode ghost-fluid est la plus efficace dans cette configuration. Lorsque des marqueurs permettent un calcul local des sauts sur l'interface, les courants parasites atteignent pratiquement l'erreur machine.

6.3.4 Rupture de barrage sur fond mouillé

Les exemples exposés précédemment sont très peu inertiels. C'est pourquoi nous présentons maintenant la rupture de barrage sur fond mouillé. Ceci permettra de comparer les différentes techniques sur un exemple inertiel. Le but est de comparer le comportement de chaque technique face au détachement de structures de l'interface (gouttelettes), ou face à une onde plongeante qui se casse par la suite. La configuration géométrique est représentée sur la figure 6.9. On retient les paramètres suivants :

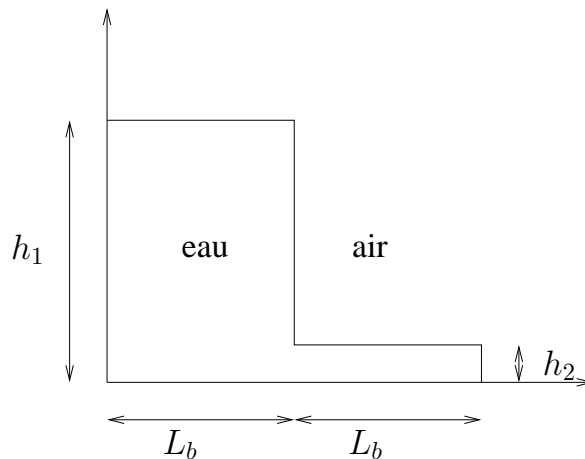


FIGURE 6.9 – Dimensions caractéristiques du cas test de rupture de barrage. Condition initiale.

6.3 Etude de différents couplages de méthodes de suivi d'interface avec différentes techniques de traitement des sauts à l'interface

$$\left\{ \begin{array}{l} L_b = 0.6 \text{ m} \\ h_1 = 0.1 \text{ m} \\ h_2 = 0.2 \text{ m} \\ \rho_{\text{eau}} = 1000 \text{ kg.m}^{-3} \\ \rho_{\text{air}} = 1.1768 \text{ kg.m}^{-3} \\ \mu_{\text{eau}} = 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1} \\ \mu_{\text{air}} = 1.85 \cdot 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1} \\ \sigma = 0.075 \text{ N.m}^{-1} \end{array} \right.$$

La rupture de barrage est étudiée aux temps $t_1 = 0.24 \text{ s}$ et $t_2 = 0.42 \text{ s}$. Les différentes techniques numériques sont comparées à la théorie caractéristique non-linéaire (Stoker [139] et Whitam [170]) qui apporte une solution analytique au problème de Saint-Venant. Une comparaison est effectuée avec une expérience de rupture de barrage (voir [159]). La figure 6.10 représente le front d'onde à $t = 0.24 \text{ s}$ après la rupture du barrage. Toutes les méthodes

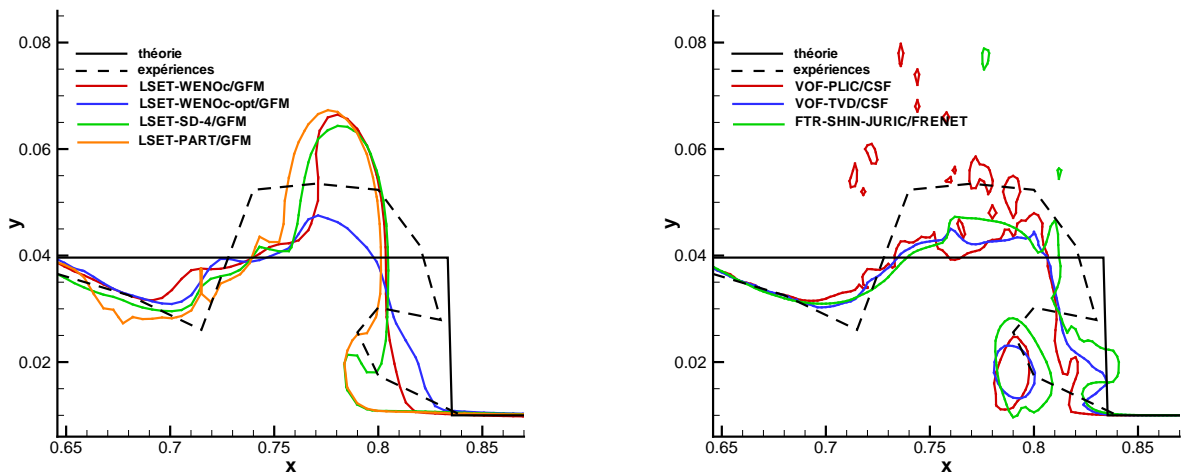


FIGURE 6.10 – Rupture de barrage. Front de l'onde. $t = 0.24 \text{ s}$.

captent précisément l'avancée du front (selon x). En revanche suivant la hauteur (axe y sur 6.10), les méthodes LSET-SD-4/GFM, LSET-WENOc/GFM et LSET-PART/GFM surestiment la hauteur d'eau au niveau du front, alors que les méthodes VOF-PLIC/CSF, VOF-TVD/CSF et LSET-WENOc-opt/GFM sous-estiment cette même hauteur. La méthode VOF-PLIC/CSF montre la formation de petites gouttes qui se détachent. Même si la conservation de la masse est assurée par cette méthode, ces gouttes ne sont pas physiques mais purement numériques, comme le montre Lafaurie [67]. Pour les méthodes qui utilisent la fonction couleur (méthodes VOF et front-tracking), on observe sur la figure 6.10 qu'une bulle est emprisonnée par la vague déferlante. Cette bulle n'apparaît pas sur l'expérience et ces méthodes (VOF et front-tracking) sont en avance par rapport à l'expérience où le déferlement apparaît plus tard. On a mesuré avec la méthode LSET-PART/GFM que le déferlement et l'emprisonnement de la bulle d'air survenait plutôt aux alentours de 0.30 s .

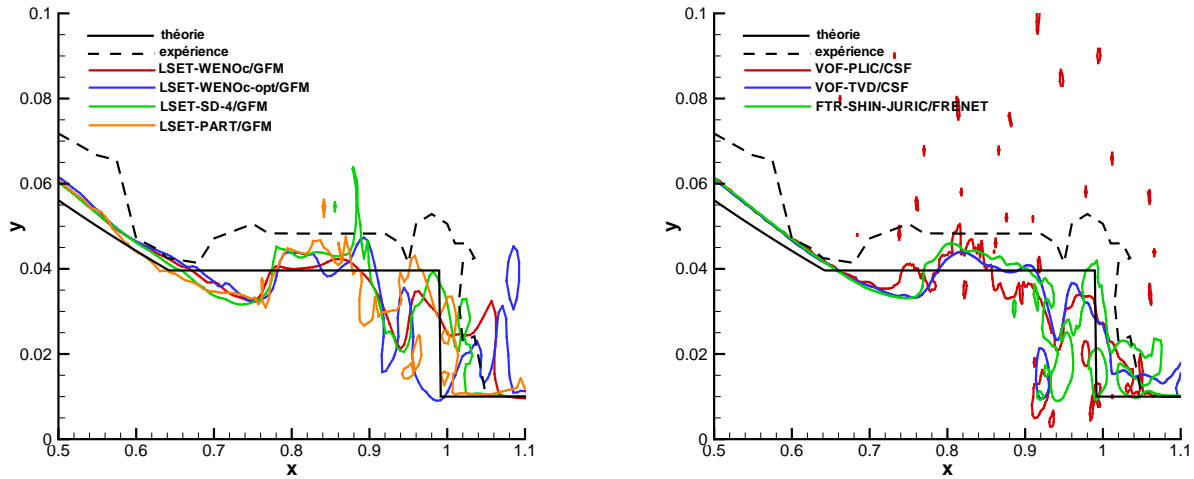


FIGURE 6.11 – Rupture de barrage. Front de l'onde. $t = 0.42 s$.

Sur la figure 6.11, la progression de l'onde est représentée à $t = 0.42 s$. Les gouttes numériques observées à $t = 0.24 s$ pour la méthode VOF-PLIC/GFM sont ici beaucoup plus nombreuses. Ceci est une des lacunes de la méthode VOF-PLIC car on ne peut pas alors différencier les gouttes physiques des gouttes réelles. Cette méthode n'est pas adaptée dans des configurations où l'interface est fortement divisée et déchirée en ligaments qui évoluent ensuite en gouttelettes par de forts gradients de vitesse. On trouve de telles formes pour l'interface dans la simulation de l'atomisation par exemple. Pour toutes les méthodes, la hauteur moyenne de l'eau est sous-estimée par rapport à celle mesurée expérimentalement, mais est plus en accord avec la hauteur obtenue théoriquement. A noter que dans les photos expérimentales, une zone de mousse ne permet pas de mesurer l'interface avec précision, ce qui peut expliquer les différences. Les méthodes VOF-PLIC, VOF-TVD et front-tracking (de Shin et Juric) laissent apparaître une bulle "coincée". On retrouve cette bulle avec la méthode LSET-PART/GFM, mais pas avec les autres méthodes qui relèvent de la level-set. Globalement, toutes les méthodes donnent des résultats similaires pour la capture du front à $t = 0.42 s$. Ainsi, pour des configurations inertielles où la turbulence va se manifester, toutes les méthodes sont à même de rendre compte de l'écoulement avec précision. Mise à part la technique VOF-PLIC/CSF qui produit en quantité des gouttes numériques artificielles (voir par exemple [161] où une inversion de phase est simulée avec une méthode VOF-PLIC/CSF : de nombreuses petites bulles (gouttes) numériques sont créées).

6.4 Conclusions

Les méthodes de suivi d'interface présentées et testées dans les chapitres précédents ont été couplées à un solveur de Navier-Stokes et à différentes techniques de prise en compte des sauts à l'interface (pour le calcul des termes de tension de surface). L'étude de ces couplages sur différents cas tests a permis de classer les différentes méthodes.

Il apparaît que la méthode ghost-fluid est la plus précise de toutes les méthodes comparées

pour le calcul des termes capillaires. En effet, le principe même de la GFM de considérer les sauts à l'interface comme raides sans aucune régularisation est plus proche de la réalité physique. Pour le suivi de l'interface, c'est le recours à la level-set qui est le mieux adapté pour utiliser la méthode ghost-fluid. En effet, le caractère distance signée de la level-set est utile pour l'extrapolation des sauts calculés sur le maillage eulérien vers l'interface. Mais justement, cette extrapolation est une des raisons qui limite la qualité de la méthode level-set/ghost-fluid. C'est pourquoi l'utilisation de marqueurs lagrangiens qui décrivent l'interface comme pour la méthode LSET-PART/GFM règle le problème de l'extrapolation du saut en calculant localement la courbure sur l'interface (enfin, du moins, la partie du saut consacrée au coefficient de tension de surface $\sigma\kappa$). La méthode LSET-PART/GFM règle le problème des courants parasites en les réduisant à la précision du solveur de Poisson. Le problème avec cette méthode reste sa lourdeur (reseeding, critère de breakup/coalescence pour l'interface) et diminue les performances globales du code. La méthode LSET-SD-4/GFM augmente le nombre de degrés de liberté, ce qui améliore la précision comme observé sur les cas-tests de Prosperetti et des courants parasites. Le problème de cette méthode réside dans l'extrapolation du champ de vitesses exprimé sur le maillage eulérien vers la grille de Gauss-Lobatto. Il est d'ailleurs nécessaire d'utiliser une extrapolation bicubique pour le champ de vitesse. Une simple interpolation bilinéaire dégrade la solution. Un autre problème avec la méthode LSET-SD-4/GFM observée sur le cas-test du disque de Zalesak est la nécessité de limiter le schéma spectral pour réduire les oscillations de l'interface. Dans les cas-tests de Prosperetti et de la bulle statique, la méthode CSF de calcul de la force de tension de surface donne de meilleurs résultats avec VOF-TVD qu'avec VOF-PLIC. En effet, la méthode VOF-TVD induit un épaississement de l'interface sur quelques mailles, ce qui est consistant avec la régularisation de la force volumique sur quelques mailles requise par la méthode CSF. La technique VOF-PLIC représente l'interface de façon plus raide et est moins adaptée pour la méthode CSF. De plus, la méthode VOF-PLIC/CSF a tendance à produire des gouttes numériques, comme on a pu le voir sur la rupture de barrage. La méthode FTR-SHIN-JURIC/FRENET utilise les avantages de la surrésolution offerte par les marqueurs. Mais la nécessité d'avoir une interface fermée est contraignant et crée des zones locales de forte courbure avec des forces de tension de surface qui finissent par contaminer toute l'interface.

Suite à toutes les études qui ont été menées, la méthode la plus efficace à utiliser par la suite serait LSET-PART/GFM. Mais ce n'est pas possible pour des DNS hautement résolues à cause du temps de calcul prohibitif pour le transport de l'interface. Le meilleur compromis s'avère être l'utilisation de la méthode LSET-WENOc/GFM. Les résultats offerts par cette méthode sont de bonne qualité pour tous les cas-test étudiés. L'implantation de cette méthode est naturelle et surtout facilement parallélisable. C'est donc cette méthode que nous avons retenue pour la suite de notre travail, et notamment pour la réalisation d'une base de données DNS 512³.

Deuxième partie

D.N.S. de l'interaction interface/turbulence

Dans la partie précédente, les équations ainsi que les différentes méthodes numériques accessibles via les deux codes de calcul utilisés pendant nos travaux ont été présentées. Les outils ont été comparés et testés sur les cas tests classiques de la littérature. Les méthodes les plus précises et les plus rapides pour étudier les configurations diphasiques turbulentes raides ont été dégagées. Le but de cette partie est l'utilisation de ces méthodes pour la compréhension fine de l'interaction interface/turbulente. Une base de données D.N.S. va être établie et tout une batterie d'études statistiques va être menée. Une fois l'interaction interface/turbulence mise en lumière dans le cas particulier d'une interface fortement déformée (configuration de l'atomisation), les modèles L.E.S. diphasiques pourront être développés à partir d'une analyse *a priori* de la base de données D.N.S. qu'on se propose d'établir dans cette partie.



Chapitre 7

La turbulence en quelques mots

Sommaire

7.1	Approche corrélatrice de la turbulence	129
7.1.1	Fonctions de corrélation	130
7.1.2	Analyse asymptotique de f et g : échelles de Taylor	131
7.1.3	Caractérisation des échelles dissipatives	133
7.2	Approche spectrale de la turbulence	134
7.2.1	Tenseur spectral	134
7.2.2	Spectre d'énergie $E(k)$	134
7.2.3	Conclusion	135

Imprévisible, chaotique, autant de termes pour qualifier le caractère aléatoire de la turbulence. Etudier la turbulence, ne serait-ce pas un peu tenter de modéliser, prédire, mettre en équations l'imprévisible? Et pourtant, la turbulence, que l'on retrouve sous une multitude de problèmes (hydrolique, énergétique, aéronautique, biologie, astrophysique, etc), possède un certain nombre de propriétés communes à toutes ses configurations et domaines d'études. Dans, [22], Chassaing parle même de *classe* ou de *régime*. Nous nous proposons ici de présenter la turbulence et d'en dégager ses propriétés intrinsèques comme les échelles turbulentes caractéristiques par exemple. Tout d'abord, contrairement à la masse volumique ou la viscosité, la turbulence n'est pas une propriété intrinsèque d'un fluide liée à sa nature. La turbulence est liée au mode de mouvement du fluide. D'une façon générale, le régime turbulent est caractérisé par la présence de variations imprévisibles et aléatoires qui s'ajoutent au comportement moyen des différentes variables de l'écoulement (vitesse, pression, température, etc). Dans la suite de ce mémoire, nous nous restreindrons au cas d'une turbulence pleinement développée à faible nombre de Mach mais grand nombre de Reynolds. Chassaing [22] définit les caractéristiques de l'agitation turbulente comme étant :

Une taille supra-moléculaire La limite des plus petites échelles de la turbulence correspond à l'équilibre entre les forces d'inertie et les forces de viscosité des plus petits mouvements d'agitation. Si η_k est la plus petite échelle spatiale de la turbulence (appelée échelle de Kolmogorov, nous y reviendrons dans les paragraphes suivants), v l'échelle de vitesse correspondante et ν la viscosité cinématique du fluide, alors l'équilibre entre viscosité et forces

d'inertie se traduit par :

$$\frac{\eta_k v}{\nu} \sim 1 \quad (7.1)$$

A l'échelle de l'agitation moléculaire, la viscosité est interprétée comme un échange de quantité de mouvement entre les molécules. Ainsi, si l_m désigne le libre parcours moyen et a la célérité du son, alors la théorie cinétique des gaz fournit une approximation pour la viscosité donnée par :

$$\nu \sim l_m \cdot a \quad (7.2)$$

En faisant le rapport des équations 7.1 et 7.2, on obtient :

$$\frac{l_m}{\eta_k} = v/a \quad (7.3)$$

Dans l'hypothèse d'un nombre de Mach modéré, ce rapport est très faible devant 1. Ainsi l'hypothèse de milieu continu est valide et l'agitation turbulente s'exerce à un niveau supra-moléculaire.

Un comportement aléatoire En régime turbulent, plusieurs réalisations d'un même écoulement ne fournissent non pas un seul, mais un ensemble de résultats pour la variable étudiée. A ce propos, il faut expliciter ce que l'on entend par "plusieurs réalisations". Il faut comprendre que les conditions initiales et aux limites sont les mêmes à des "détails" inconnus qui nous échappent parce qu'ils sont en dessous de la précision du phénomène étudié. Lorenz [87] a montré que des variations infimes entre deux conditions initiales peuvent conduire à des situations finales sans rapport entre elles. Le caractère aléatoire de la turbulence est ainsi mis en avant, ce qui rend difficile par exemple la prédiction à long terme pour les météorologues.

Un dénombrement infini Par transformée de Fourier, l'évolution spatiale ou temporelle d'une variable peut être transposée dans l'espace spectral afin d'obtenir une représentation fréquentielle de la variable. Alors, les répartitions spectrales ou spectres en fréquence d'une agitation turbulente présentent une répartition continue sans une plage d'échelles bornée (par les dimensions géométriques de l'écoulement, ou l'échelle de Kolmogorov par exemple). Ces spectres en fréquence ne présentent pas de raies.

Une structure tridimensionnelle Même si le champ moyen a une structure bidimensionnelle, les fluctuations turbulentes sont essentiellement tridimensionnelles.

Une présence intermittente Le caractère turbulent peut ne pas être présent à tout instant ni en tout point du champ. C'est ce qu'on appelle l'intermittence de la turbulence.

Une cinématique rotationnelle Les fluctuations de vitesses sont porteuses de fluctuations de rotationnel. En effet, la décomposition du tenseur gradient de vitesse en partie symétrique et antisymétrique reste valide pour la partie fluctuante de la vitesse. Ainsi, même si la turbulence ne produit pas de rotationnel, elle a un effet sur cette quantité. Notamment, elle intervient dans le renforcement de la production de rotationnel en proche paroi du fait de l'augmentation locale des gradients de vitesse. En raison de la tridimensionnalité, les

mécanismes d'interaction tourbillonnaire provoque des transferts internes de vortacité fluctuante. Enfin, l'agitation turbulente contribue à la diffusion de vortacité hors des zones de production.

Une dynamique non linéaire Les effets du champ fluctuant ne peuvent pas être superposés de façon linéaire à ceux du champ du mouvement d'ensemble. En effet, il y a interaction entre les champs fluctuant et moyen. Ces interactions sont dues aux non-linéarités des équations de Navier-Stokes (via le terme de convection par exemple). Lorsque des bilans d'énergie cinétique sont effectués par exemple, des échanges entre mouvement moyen et fluctuant sont mis en lumière, traduisants la non linéarité des phénomènes physiques mis en jeu.

Une énergie dissipative Le taux de dissipation propre à l'agitation turbulente vient s'ajouter à celui du mouvement d'ensemble.

7.1 Approche corrélatoire de la turbulence

Comme il a été vu précédemment, la turbulence est caractérisée notamment par un comportement aléatoire et intermittent. Mais ceci ne signifie pas que la turbulence puisse être assimilée à un bruit blanc. Les fluctuations mesurées en un point $A(\mathbf{x}_1, t_1)$ ne sont pas décorréelées de celles mesurées au point $A(\mathbf{x}_2, t_2)$ si le point (\mathbf{x}_1, t_1) est dans le voisinage de (\mathbf{x}_2, t_2) . C'est la mémoire spatio-temporelle de la turbulence. L'étude des corrélations en un point s'avère fondamentale via notamment le tenseur des contraintes de Reynolds $-\rho \overline{u_i u_j}$. Les corrélations statistiques en deux points sont l'extension des corrélations en un point. Les propriétés mathématiques des corrélations multipoints restent bien souvent inutilisables dans la pratique. C'est pourquoi nous nous limiterons dans la suite à des champs de turbulence homogène et isotrope (T.H.I.).

Avant de se lancer dans l'étude corrélatoire de la turbulence, il faut définir la notion de moyenne. Le champ d'écoulement turbulent est décrit par la vitesse \mathbf{U} , la pression P et la température T qui peuvent être assimilées à des fonctions aléatoires. Ces fonctions aléatoires peuvent se décomposer comme la somme d'une contribution moyenne et d'une contribution fluctuante.

$$\mathbf{U} = \langle \mathbf{U} \rangle + \mathbf{u} \tag{7.4a}$$

$$P = \langle P \rangle + p \tag{7.4b}$$

$$T = \langle T \rangle + t \tag{7.4c}$$

($\langle U \rangle, \langle P \rangle, \langle T \rangle$) étant les contributions moyennes et (\mathbf{u}, p, T) les fluctuations turbulentes. La moyenne statistique $\langle \cdot \rangle$ est en toute rigueur définie par :

$$\langle A \rangle (x_i, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{n=N} A_n(x_i, t) \tag{7.5}$$

où $A_n(x_i, t)$ est une collection d'échantillons représentatifs de la fonction aléatoire A . En pratique, l'utilisation de la moyenne statistique est contraignante car il faut en toute rigueur

réaliser l'écoulement un grand nombre de fois en gardant les mêmes paramètres (notamment les mêmes paramètres turbulents, c'est-à-dire les mêmes échelles turbulentes, énergie cinétique, taux de dissipation, etc) mais avec des conditions initiales différentes. La réalisation de cette moyenne statistique est donc très coûteuse et elle est en pratique remplacée par une moyenne temporelle ou spatiale lorsque l'hypothèse d'ergodicité peut s'appliquer (voir le théorème ergodique de Birkhoff [14, 15]). Ainsi, la moyenne au sens statistique du terme s'obtient indirectement à partir d'une moyenne temporelle ou spatiale qui ne concerne qu'une seule réalisation de l'écoulement. Dans notre cas et dans la suite du mémoire, $\langle \cdot \rangle$ fera référence à la moyenne spatiale.

7.1.1 Fonctions de corrélation

Soient $P_1(x_i, i = 1, 2, 3)$ et $P_2(x_j, j = 1, 2, 3)$ deux points d'un champ turbulent, (α) et (β) deux directions de l'espace définies par les vecteurs unitaires α et β de cosinus directeurs e_α^l et e_β^k respectifs. Alors la corrélation double spatio-temporelle normée est définie de façon générale par :

$$R_{\alpha,\beta}(P_1, P_2, t_1, t_2) = \frac{\langle u_\alpha(P_1, t_1)u_\beta(P_2, t_2) \rangle}{\sqrt{\langle u_\alpha^2(P_1, t_1) \rangle} \sqrt{\langle u_\beta^2(P_2, t_2) \rangle}} \quad (7.6)$$

avec $u_\alpha(P_1, t_1)$ la composante sur α du vecteur d'agitation au point P_1 et au temps t_1 , et $u_\beta(P_2, t_2)$ la composante sur β du vecteur d'agitation au point P_2 et au temps t_2 . Dans l'équation 7.6, $R_{\alpha,\beta}$ est une fonction de huit variables. Par des conditions de stationnarité, ce nombre peut être réduit à deux. Si le trièdre α et β est choisi comme un repère orthonormé, et si la corrélation porte sur les composantes (u_1, u_2, u_3) du vecteur fluctuation de vitesse \mathbf{u} , alors le tenseur des corrélations est donné par :

$$Q_{ij}(P_1, P_2, t) = \langle u_i(P_1, t)u_j(P_2, t) \rangle \quad (7.7)$$

et sa version normée par :

$$R_{ij}(P_1, P_2, t) = \frac{\langle u_i(P_1, t)u_j(P_2, t) \rangle}{\sqrt{\langle u_i^2(P_1, t) \rangle} \sqrt{\langle u_j^2(P_2, t) \rangle}} \quad (7.8)$$

Dans le cas d'une T.H.I., l'homogénéité se traduit par la stationnarité dans l'espace de toute moyenne statistique des fluctuations (autrement dit, invariance par translation). Ainsi, le tenseur Q_{ij} n'est pas fonction des points P_1 et P_2 mais uniquement de la distance séparant ces deux points. On a alors en T.H.I. :

$$R_{ij}(P_1, P_2, t) = R_{ij}(r, t) \quad (7.9)$$

où r est la distance séparant les points P_1 et P_2 . Ceci a des conséquences directes sur le tenseur des corrélations :

- Les corrélations de vitesses en un point sont constantes dans tout le champ et ne dépendent que du temps.
- Toute propriété statistique en deux points est invariante par translation spatiale conservant le vecteur $\xi = \mathbf{P}_1\mathbf{P}_2$.
- L'homogénéité du champ turbulent assure que $Q_{ij}(\xi, t) = Q_{ji}(-\xi, t)$.

En T.H.I., la construction des échelles caractéristiques de la turbulence passe par la mise en place des fonctions de corrélation longitudinale $f(r, t)$ et transversale $g(r, t)$.

$$f(r, t) = \frac{\langle u_1(P_1, t)u_1(P_2, t) \rangle}{u'^2} \quad (7.10a)$$

$$g(r, t) = \frac{\langle u_2(P_1, t)u_2(P_2, t) \rangle}{u'^2} \quad (7.10b)$$

Le schéma 7.1 explique le principe de calcul de $f(r)$ et de $g(r)$. Dans le cas d'une T.H.I. et

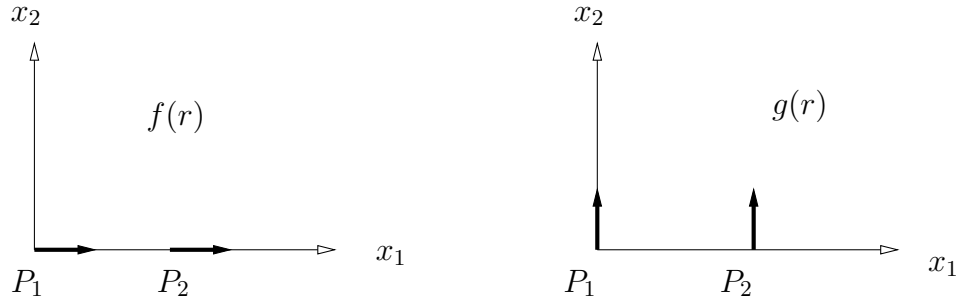


FIGURE 7.1 – Fonctions de corrélations longitudinale $f(r)$ et transversale $g(r)$.

lorsque l'hypothèse d'incompressibilité est réalisée, les fonctions $f(r)$ et $g(r)$ (Eq. 7.10) sont liées par la relation de Kármán et Howarth [59].

$$g(r, t) = f(r, t) + \frac{r}{2} \frac{\partial f(r, t)}{\partial r} \quad (7.11)$$

Ainsi, la description corrélatrice de la turbulence passe de 9 fonctions (les Q_{ij}) de 7 variables (P_1 , P_2 et t) dans le cas général à une seule fonction ($f(r)$) à 2 variables (r et t) dans le cas d'une T.H.I. isovolume.

7.1.2 Analyse asymptotique de f et g : échelles de Taylor

L'étude asymptotique des fonctions de corrélations longitudinales et transversales en $r = 0$ permet de définir les micro-échelles de Taylor longitudinale $\lambda_f(t)$ et transversale $\lambda_g(t)$.

$$\frac{1}{\lambda_f^2(t)} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f(r, t)}{\partial r^2} \right)_{r=0} \quad (7.12a)$$

$$\frac{1}{\lambda_g^2(t)} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 g(r, t)}{\partial r^2} \right)_{r=0} \quad (7.12b)$$

On montre (cf. [22]) que $f(r)$ admet comme courbe osculatrice la parabole d'équation $y = 1 - r^2/\lambda_f^2$. Ainsi, λ_f apparaît comme la distance du point d'intersection de cette parabole avec l'axe des abscisses. Il sera montré dans la suite que λ_f est liée au taux de dissipation visqueuse de l'énergie cinétique turbulente. La relation de Kármán et Howarth permet de lier λ_f et λ_g :

$$\lambda_f = \sqrt{2}\lambda_g \quad (7.13)$$

Chapitre 7. La turbulence en quelques mots

L'étude asymptotique de $f(r)$ et $g(r)$ au voisinage de $+\infty$ permet de définir les macro-échelles de Taylor longitudinales $\Lambda_f(t)$ et transversales $\Lambda_g(t)$.

$$\Lambda_f(t) = \int_0^{+\infty} f(r) dr \quad (7.14a)$$

$$\Lambda_g(t) = \int_0^{+\infty} g(r) dr \quad (7.14b)$$

Les macro-échelles de Taylor peuvent être interprétée comme la distance maximum d'extension d'un processus équivalent mais dont la corrélation vaut 1. Ainsi les macro-échelles de Taylor représentent la distance limite au-delà de laquelle les fluctuations de vitesse sont totalement décorréliées d'elles-même. Avant cette limite, les fluctuations sont totalement corrélées avec elles-même. Les macro-échelles de Taylor constituent donc la limite grossière de la "mémoire" de la turbulence. Ici encore, la relation de Kármán et Howarth fournit :

$$\Lambda_f = 2\Lambda_g \quad (7.15)$$

Dans tout le reste de cette thèse, Λ_f sera notée Λ et représentera l'échelle intégrale. λ_g sera notée λ et sera appelée l'échelle de Taylor.

$$\begin{cases} \Lambda & \equiv & \Lambda_f \\ \lambda & \equiv & \lambda_g \end{cases}$$

Les échelles de Taylor (micro et macro) peuvent être reliée à k l'énergie cinétique turbulente et ϵ , le taux de dissipation visqueuse de k . L'énergie cinétique k est définie comme la demi-trace du tenseurs de Reynolds. k et ϵ sont donnés par :

$$k = \frac{1}{2} \langle u_i u_i \rangle \quad (7.16a)$$

$$\epsilon = \frac{\nu}{2} \left\langle \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle \quad (7.16b)$$

La fluctuation de vitesse u' est définie comme :

$$k = \frac{3}{2} u'^2 \quad (7.17)$$

En T.H.I. incompressible, ϵ est égal à la pseudo-dissipation qui apparaît dans l'équation de transport des tensions de Reynolds. En T.H.I. isovolume, on a donc :

$$\epsilon = \nu \left\langle \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right\rangle \quad (7.18)$$

Finalement, les micro-échelles de Taylor sont reliées au taux de dissipation visqueuse de la façon suivante :

$$\epsilon = 15\nu \frac{u'^2}{\lambda^2} \quad (7.19)$$

Bien que reliées au taux de dissipation visqueuse, les micro-échelles de Taylor ne caractérisent pas les structures dissipatives de l'énergie. Nous verrons plus loin que les échelles dissipatives

sont les échelles de Kolmogorov. Le taux de dissipation visqueuse ϵ peut être évalué à partir de données relatives aux tourbillons porteurs d'énergie. Ainsi, ϵ est également donné par :

$$\epsilon = \frac{u'^3}{\Lambda} \quad (7.20)$$

Aux échelles de Taylor sont associées des nombres de Reynolds :

$$Re_\lambda = \frac{u'\lambda}{\nu} \quad (7.21a)$$

$$Re_\Lambda = \frac{u'\Lambda}{\nu} \quad (7.21b)$$

Re_λ est un nombre de Reynolds turbulent et c'est lui qui va caractériser la séparation d'échelle et donc la qualité de l'écoulement. En effet, la séparation d'échelles est donnée par le rapport Λ/λ . En combinant 7.19 et 7.20, on montre que $\frac{\Lambda}{\lambda} = \frac{Re_\lambda}{15}$.

7.1.3 Caractérisation des échelles dissipatives

Dans un spectre de turbulence, il existe deux grandes plages de nombres d'onde : ceux qui correspondent aux échelles porteuses d'énergie et les structures dissipatives. Les structures énergétiques sont caractérisées par l'échelle intégrale Λ et l'échelle de vitesse u' . On peut alors construire une échelle de temps caractéristique des grosses structures de l'écoulement :

$$T_e = \frac{\Lambda}{u'} \quad (7.22)$$

T_e est qualifié de temps de retournement. Pour ce qui est des structures dissipatives, l'équation 7.20 montre que le montant d'énergie à dissiper ϵ est indépendant des structures dissipatives. En effet, ϵ est fonction de u' et Λ , qui correspondent aux structures énergétiques et non dissipatives. Ainsi, le comportement aux échelles dissipatives est entièrement déterminé par les seuls paramètres extérieurs à ces échelles à savoir la viscosité du fluide ν et ϵ . Les échelles dissipatives ont donc un caractère universel. La limite d'existence des structures les plus fines est fixée par la condition $Re_{\eta_k} = 1$ où Re_{η_k} est le nombre de Reynolds basé sur les plus petites échelles de la turbulence appelées échelles de Kolmogorov. Ces échelles spatiales η_k , en temps τ_k et vitesse v_k sont respectivement définies par :

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (7.23a)$$

$$v_k = (\nu\epsilon)^{1/4} \quad (7.23b)$$

$$\tau_k = \left(\frac{\epsilon}{\nu^3} \right)^{1/4} \quad (7.23c)$$

La séparation des échelles énergétiques et dissipatives est fixée par Re_λ qui, lorsqu'il est suffisamment grand, autorise l'apparition d'une région où le mécanisme dominant est le transfert d'énergie vers les petites structures sans que la dissipation visqueuse soit sensible. Dans cette région, le spectre d'énergie ne dépend plus de la viscosité et peut être écrit sous la forme suivante : $E(k) = C_k \epsilon^{2/3} k^{-5/3}$ où C_k est la constante de Kolmogorov.

7.2 Approche spectrale de la turbulence

Dans cette partie, les résultats seront établis dans le cas de la turbulence homogène isotrope. Les relations précédentes ont été établies dans l'espace physique où les variables naturelles sont les coordonnées d'espace. De telles relations ont des expressions équivalentes dans l'espace spectral. La transformée de Fourier est l'outil qui permet de passer de façon bijective de l'espace physique à l'espace spectral et réciproquement. Pour traiter de problèmes numériques, la discrétisation de la transformée de Fourier est nécessaire. La discrétisation "naïve" aboutit à des calculs de transformées de Fourier dont la multiplicité est en $\mathcal{O}(N^2)$, où N est le nombre de points du maillage. L'utilisation de la transformée de Fourier rapide ou FFT (Fast Fourier Transform) autorise une multiplicité de $\mathcal{O}(N \ln N)$. Une description de la FFT est proposée en annexe A.

7.2.1 Tenseur spectral

La transformée de Fourier du tenseur spatial des corrélations de fluctuations de vitesse $Q_{ij}(\mathbf{r}, t)$ aboutit au tenseur spectral tridimensionnel $\Phi_{ij}(\mathbf{k}, t)$ où \mathbf{k} est le vecteur d'onde.

$$Q_{ij}(\mathbf{r}, t) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{ij}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k} \quad (7.24a)$$

$$\Phi_{ij}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{8\pi^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} Q_{ij}(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (7.24b)$$

Les propriétés du tenseur Q_{ij} se répercutent sur le tenseur Φ_{ij} . Notamment, si la turbulence est homogène :

$$Q_{ij}(\mathbf{r}, t) = Q_{ji}(-\mathbf{r}, t) \quad (7.25a)$$

$$\Phi_{ij}(\mathbf{k}, t) = \Phi_{ji}^*(\mathbf{k}, t) \quad (7.25b)$$

Si la turbulence est isotrope :

$$Q_{ij}(\mathbf{r}, t) = Q_{ji}(\mathbf{r}, t) \quad (7.26a)$$

$$\Phi_{ij}^*(\mathbf{k}, t) = \Phi_{ij}(\mathbf{k}, t) \quad (7.26b)$$

et le tenseur Φ_{ij} est à composantes réelles. Ainsi, dans le cas de la THI, le tenseur spectral est réel et symétrique. Sous les hypothèses de THI en incompressible, la théorie des invariants montre que Φ_{ij} se met sous la forme :

$$\Phi_{ij}(\mathbf{k}, t) = \Phi_{ij}(k, t) = A(k, t) [k_i k_j - k^2 \delta_{ij}] \quad (7.27)$$

où k est la norme du vecteur d'onde \mathbf{k} , k_i est la $i^{\text{ème}}$ coordonnée du vecteur d'onde et A une fonction qui ne dépend que de k . Elle sera explicitée dans le paragraphe suivant.

7.2.2 Spectre d'énergie $E(k)$

La grandeur spectrale qui présente un intérêt pratique est la densité spectrale d'énergie ou spectre d'énergie $E(k, t)$. Le spectre d'énergie est relié à l'énergie cinétique par la formule suivante :

$$k(t) = \int_0^{+\infty} E(k, t) dk \quad (7.28)$$

Ainsi $E(k)$ représente la contribution des nombres d'onde compris entre k et $k+dk$ à l'énergie cinétique turbulente. La représentation du spectre $E(k)$ fournit la répartition de l'énergie cinétique turbulente en fonction du nombre d'onde. Le taux de dissipation visqueuse ϵ et l'échelle intégrale Λ s'expriment également en fonction du spectre d'énergie.

$$\epsilon = 2\nu \int_{-\infty}^{+\infty} k^2 E(k, t) dk \quad (7.29a)$$

$$\Lambda = \frac{\pi}{2u'^2} \int_0^{+\infty} \frac{E(k)}{k} dk \quad (7.29b)$$

Exprimons $E(k)$ en fonction du tenseur spectral. L'équation 7.24 est intégrée dans la base sphérique $(\mathbf{k}, \mathbf{k}_\theta, \mathbf{k}_\phi)$. La base orthornormée $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ fixe sous-jacente à la base sphérique est choisit de telle sorte que $\mathbf{k}_3 = \mathbf{r}$. On obtient alors :

$$Q_{ii}(r, t) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{+\infty} \Phi_{ii}(k, t) k^2 \left[\int_0^\pi e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta \right] dk \quad (7.30a)$$

$$Q_{ii}(r, t) = 4\pi \int_0^{+\infty} \Phi_{ii}(k, t) k^2 \frac{\sin(kr)}{kr} dk \quad (7.30b)$$

$$2k(t) = Q_{ii}(0, t) = 4\pi \int_0^{+\infty} \Phi_{ii}(k, t) k^2 dk \quad (7.30c)$$

L'identification avec l'équation 7.28 fournit immédiatement $E(k, t) = 2\pi k^2 \Phi_{ii}(k, t)$. La contraction de l'équation 7.27 donne $\Phi_{ii}(k, t) = -2k^2 A(k, t)$. On obtient alors immédiatement l'équation qui relie le tenseur spectral au spectre d'énergie :

$$\Phi_{ij}(k, t) = \frac{E(k, t)}{4\pi k^2} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \quad (7.31)$$

7.2.3 Conclusion

Les principales caractéristiques de la turbulence ont été rappelées ainsi que les échelles qui caractérisent la mémoire de la turbulence. L'énergie amorce une cascade des plus grandes échelles énergétiques vers les petites échelles dissipatives. Ce transfert est caractérisé par une zone inertielle où la dissipation visqueuse est absente. Parmi tous les écoulements turbulents, la T.H.I. permet de nombreuses simplifications dans les équations régissant l'écoulement. Ceci fait de la T.H.I. le cadre idéal pour une étude théorique où la turbulence est parfaitement calibrée et les résultats physiquement interprétables. En effet, l'étude de la T.H.I. dans l'espace spectral autorise l'accès à la répartition de l'énergie en fonction du nombre d'onde via le spectre d'énergie $E(k)$. Pour le phénomène d'interaction entre la turbulence et une interface, l'étude spectrale de la T.H.I. nous permettra d'analyser à quelle fréquence ce couplage a lieu. Un transfert d'énergie entre les nombres d'onde sera mis en lumière. Dans un premier temps, il nous faut construire le champ de T.H.I. monophasique et le valider avant d'ajouter une interface. La mise en œuvre et la validation de la T.H.I. monophasique sont l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 8

T.H.I. monophasique : génération et validation

Sommaire

8.1 Spectre d'énergie initial	137
8.1.1 Génération du spectre	138
8.1.2 Présentation du spectre retenu et validations	139
8.2 DNS de la T.H.I. monophasique	144
8.2.1 Problématiques liées aux DNS hautement résolues	149

L'étude de l'interaction entre la turbulence et une interface nécessite la connaissance précise de la répartition spectrale de l'énergie. Il a été montré dans les chapitres précédents que les hypothèses d'homogénéité et d'isotropie en situation isovolume apportent des simplifications à la description spectrale de la turbulence. En effet, sous ces hypothèses, le tenseur spectral 3D ne dépend que d'une seule fonction scalaire. Son intégration conduit à la définition du spectre d'énergie qui régit la distribution spectrale de l'énergie. Lorsque la turbulence est générée par le sillage d'une bulle par exemple, on parle de pseudo-turbulence car la turbulence engendrée n'a pas les mêmes propriétés qu'une turbulence pleinement développée avec une zone inertielle. La configuration académique d'une T.H.I. a donc été retenue pour permettre une analyse spectrale de la turbulence et une étude de l'interaction interface/turbulence nombre d'onde par nombre d'onde.

8.1 Spectre d'énergie initial

Dans le code utilisé pour résoudre les équations de Naviers-Stokes, le champ de vitesses est exprimé dans l'espace réel. Afin de réaliser le calcul d'une T.H.I. décroissante, il faut imposer comme condition initiale au code un champ de vitesses turbulentes qui satisfait les conditions d'incompressibilité, d'homogénéité et d'isotropie. Puis au cours du temps, la dissipation visqueuse (et malheureusement numérique) diminue l'énergie cinétique du système. Le paragraphe suivant montre comment à partir d'un spectre d'énergie $E(k)$ (donc exprimé dans l'espace de Fourier), on obtient le champ de vitesses turbulentes réel dont les caractéristiques statistiques sont celles imposées par le spectre $E(k)$.

8.1.1 Génération du spectre

Tout d'abord, à partir du spectre $E(\mathbf{k})$, on construit un champ de vitesses dans l'espace spectral. Puis, par transformée de Fourier inverse, on exprime le champ de vitesses dans l'espace réel. Si u, v et w sont les composantes de la vitesse \mathbf{u} dans l'espace réel, alors leurs transformées de Fourier s'écrivent \hat{u}, \hat{v} et \hat{w} respectivement. On pose $\hat{\mathbf{u}} = (\hat{u}, \hat{v}, \hat{w})$. Le champ réel vérifie l'hypothèse d'incompressibilité, ce qui se traduit dans l'espace spectral par :

$$k_i \hat{u}_i = 0 \quad (8.1)$$

où les k_i sont les composantes du nombre d'onde \mathbf{k} . Ainsi \mathbf{k} est orthogonal au vecteur vitesse dans l'espace spectral. Si $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ est la base orthonormée canonique, on se donne une nouvelle base orthonormée $(\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3)$ telle que $\mathbf{e}'_3 = \frac{\mathbf{k}}{\|\mathbf{k}\|}$. Alors, l'orthogonalité de $\hat{\mathbf{u}}$ avec \mathbf{k} est donnée par :

$$\hat{\mathbf{u}} = \hat{u}'_1 \mathbf{e}'_1 + \hat{u}'_2 \mathbf{e}'_2 \quad (8.2)$$

Dans [16], la base suivante est proposée pour obtenir une base orthonormée :

$$\mathbf{e}'_3 = \left(\frac{k_1}{k}, \frac{k_2}{k}, \frac{k_3}{k} \right)_{(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)} \quad (8.3a)$$

$$\mathbf{e}'_2 = \left(\frac{k_1 k_3}{k \sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, \frac{k_2 k_3}{k \sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, -\frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}{k} \right)_{(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)} \quad (8.3b)$$

$$\mathbf{e}'_1 = \left(\frac{k_2}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, -\frac{k_1}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, 0 \right)_{(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)} \quad (8.3c)$$

Le tenseur spectral est relié aux vitesses spectrales par la relation suivante :

$$\langle \hat{u}_i^*(\mathbf{k}) \hat{u}_j(\mathbf{k}') \rangle = \Phi_{ij}(\mathbf{k}') \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (8.4)$$

où * désigne le complexe conjugué et δ est le symbole de Kronecker. Ainsi, deux composantes de Fourier du champ de vitesse ne sont corrélées que si elles correspondent au même nombre d'onde. En utilisant les équations 7.31, 8.3 et 8.4, on obtient finalement :

$$|\hat{u}'_1|^2 + |\hat{u}'_2|^2 = \Phi_{ii}(\mathbf{k}) = \frac{E(\mathbf{k})}{2\pi k^2} \quad (8.5)$$

On choisit

$$\hat{u}'_1 = \sqrt{\frac{E(\mathbf{k})}{2\pi k^2}} \cos(\theta) \exp(j\theta_1) \quad (8.6a)$$

$$\hat{u}'_2 = \sqrt{\frac{E(\mathbf{k})}{2\pi k^2}} \sin(\theta) \exp(j\theta_2) \quad (8.6b)$$

où θ et θ_i sont des nombres aléatoires qui déterminent la phase du vecteur $\hat{\mathbf{u}}$. Finalement :

$$\hat{\mathbf{u}} = \frac{\hat{u}'_1 k_2 k + \hat{u}'_2 k_1 k_3}{k \sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \mathbf{e}_1 + \frac{\hat{u}'_2 k_2 k_3 - \hat{u}'_1 k_1 k}{k \sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \mathbf{e}_2 - \frac{\hat{u}'_2 \sqrt{k_1^2 + k_2^2}}{k} \mathbf{e}_3 \quad (8.7)$$

Ainsi, les composantes de la vitesse spectrale sont calculées à partir du spectre d'énergie $E(\mathbf{k})$. La turbulence, la partie chaotique, est prise en compte à travers les nombres aléatoires θ et θ_i . Ces nombres aléatoires sont choisis selon une loi de densité uniforme sur l'intervalle $[0; 2\pi]$. On a remarqué que la "qualité" du générateur de nombres aléatoires se répercute sur la qualité de la turbulence. Nous avons essayé différents générateurs de nombres aléatoires, allant du plus simple au plus compliqué. Si le tirage n'est pas parfaitement aléatoire (c'est le cas pour les générateurs bon marché, vite codés), l'isotropie de la turbulence est altérée. Un effort tout particulier doit donc être fait sur le tirage aléatoire des phases des vitesses spectrales. Une fois le champ $\hat{\mathbf{u}}$ connu, une transformée de Fourier inverse permet d'obtenir le champ de vitesses réelles.

Une remarque doit être faite à propos de la validité du champ généré. En effet, ce champ vérifie l'hypothèse d'incompressibilité mais ne vérifie pas *a priori* l'équation de quantité de mouvement.

8.1.2 Présentation du spectre retenu et validations

Le spectre d'énergie que nous avons retenu comme condition initiale est celui proposé par Mansour [92]. La résolution utilisée par Mansour pour simuler le spectre 8.8 est de 128^3 avec un code pseudo-spectral.

$$E(\mathbf{k}) = \frac{q^2}{2A} \frac{1}{k_p^{\gamma+1}} k^\gamma \exp\left(-\frac{\gamma}{2} \left(\frac{k}{k_p}\right)^2\right) \quad (8.8)$$

avec les paramètres suivants :

$$\begin{cases} q^2 = 3 \\ \gamma = 4 \\ A = 0.1175 \\ k_p = 9 \end{cases}$$

Le champ de vitesses réelles est généré à partir du spectre $E(\mathbf{k})$ selon l'algorithme présenté précédemment. Pour qualifier la qualité du champ de vitesses réelles que nous avons obtenu, des statistiques sont menées sur les vitesses réelles et comparées à celles directement données par le spectre d'énergie $E(\mathbf{k})$. Dans tout le reste de notre travail, la résolution est de 512^3 . La pertinence de cette résolution sera montrée par la suite.

Le tableau 8.1 résume quelques grandeurs caractéristiques de la turbulence générées à partir du spectre 8.8. La dimension de la boîte est 2π et la viscosité du fluide vaut 0.003, conformément à [92]. Toutes les grandeurs sont adimensionnelles. Dans le tableau 8.1, deux types de données sont présentées : les premières sont directement données par le spectre $E(\mathbf{k})$, alors que les secondes sont fournies par des statistiques menées sur le champ de vitesses réelles. Dans le tableau 8.1, les $L_{ii,j}$ sont définies de la façon suivante :

$$L_{ii,j} = \int_0^{+\infty} R_{ii}(x_j) dx_j \quad \text{sans sommation d'indice pour } R_{ii} \quad (8.9)$$

$L_{ii,j}$ est la distance de corrélation dans la direction \mathbf{e}_j pour les composantes selon \mathbf{e}_i du vecteur vitesse. Ainsi Λ_f est la moyenne de $L_{11,1}$, $L_{22,2}$, $L_{33,3}$ et Λ_g la moyenne de $L_{11,2}$, $L_{11,3}$, $L_{22,1}$, $L_{22,3}$, $L_{33,1}$ et $L_{33,2}$.

Paramètres calculés directement à partir du spectre		
grandeur	équation	valeur
k	(7.28)	1.5
ϵ	(7.29)	0.91125
$\Lambda = \Lambda_f$	(7.29)	0.2785
Λ_g	(7.15)	0.1392
λ_f	(7.19)	0.3142
$\lambda = \lambda_g$	(7.19)	0.2222
η_k	(7.23)	$1.312 \cdot 10^{-2}$
τ_k	(7.23)	$5.738 \cdot 10^{-2}$
Re_λ	(7.21)	74
Paramètres calculés à partir du champ de vitesse réel		
grandeur	équation	valeur
$\langle \mathbf{U} \rangle$ sur \mathbf{e}_x	(7.4)	$2.92 \cdot 10^{-15}$
$\langle \mathbf{U} \rangle$ sur \mathbf{e}_y	(7.4)	$4.18 \cdot 10^{-16}$
$\langle \mathbf{U} \rangle$ sur \mathbf{e}_z	(7.4)	$1.69 \cdot 10^{-15}$
$\nabla \cdot \mathbf{u}$		$2.95 \cdot 10^{-13}$
u'	(7.16)	1.0000000000143
k	(7.16)	1.500000000043
$\langle uv \rangle / u'^2$	(7.8)	0.33%
$\langle uw \rangle / u'^2$	(7.8)	0.85%
$\langle vw \rangle / u'^2$	(7.8)	0.71%
Λ_f	(7.14)	0.2780589
Λ_g	(7.14)	0.1487494
$L_{11,1} / \Lambda_f$	(8.9)	1.003
$L_{22,2} / \Lambda_f$	(8.9)	0.965
$L_{33,3} / \Lambda_f$	(8.9)	1.033
$L_{11,2} / \Lambda_g$	(8.9)	0.990
$L_{11,3} / \Lambda_g$	(8.9)	0.913
$L_{22,1} / \Lambda_g$	(8.9)	1.008
$L_{22,3} / \Lambda_g$	(8.9)	1.036
$L_{33,1} / \Lambda_g$	(8.9)	0.972
$L_{33,2} / \Lambda_g$	(8.9)	1.08
T_e	(7.22)	0.278
Re_Λ	(7.21)	93
$\eta_k / \Delta x$		1.07
L_b / Λ		23

TABLE 8.1 – Paramètres adimensionnels de la condition initiale de T.H.I.

L'étude du tableau 8.1 montre que l'écoulement généré est bien à moyenne et divergence nulles. Les corrélations sont toutes inférieures à 1%, ce qui garantit une très bonne isotropie pour le champ turbulent. Pour u' et k , les erreurs relatives entre les valeurs calculées directement à partir du spectre et celles calculées à partir du champ réel de vitesses sont de

l'ordre de 10^{-11} , ce qui montre que la résolution spatiale est suffisante pour que l'hypothèse d'ergodicité puisse être faite. En effet, en cas de sous-résolution, les moyennes spatiales ne correspondent plus à des moyennes statistiques convergées, ce qui se manifeste par des écarts importants entre les valeurs calculées d'après le spectre (qui sont exactes) et celles calculées à partir du champ de vitesses réelles après application de la moyenne. Ces écarts se répercutent sur l'énergie cinétique turbulente k et les échelles intégrales Λ_f , Λ_g et les $L_{ii,j}$.

Sur le tableau 8.1, l'étude des échelles intégrales $L_{ii,j}$ montre que les trois directions \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y et \mathbf{e}_z sont bien homogènes et qu'aucune direction n'est privilégiée. L'écart relatif par rapport à l'échelle intégrale globale Λ_f ou Λ_g est de moins de 10%. Les calculs effectués sur le champ réel de vitesses donnent $\Lambda_f = 1.87\Lambda_g$, validant la relation de Kàrmàn Howarth à 6% près, ce qui donne une indication supplémentaire quant à la qualité d'homogénéité et d'isotropie de l'écoulement.

La table 8.1 indique que le rapport L_b/Λ vaut 23. D'après Boughanem [16], le domaine de calcul doit contenir au minimum 8 échelles de longueur intégrale. Au cours de la simulation numérique de T.H.I. décroissante, l'échelle de longueur Λ augmente et le rapport L_b/Λ tend à diminuer. On montrera dans la suite que ce rapport est minoré par 7 au bout de 40 temps de retournement, ce qui nous garantit la décorrélation des champs sur la longueur du domaine de calcul pour toute la durée de la simulation. Sur la figure 8.1, on a représenté la fonction $f(r)$ en fonction de r , distance de corrélation. La fonction $f(r)$ est celle qui correspond au spectre 8.8. Afin de garantir un échantillon statistique représentatif de la turbulence simulée,

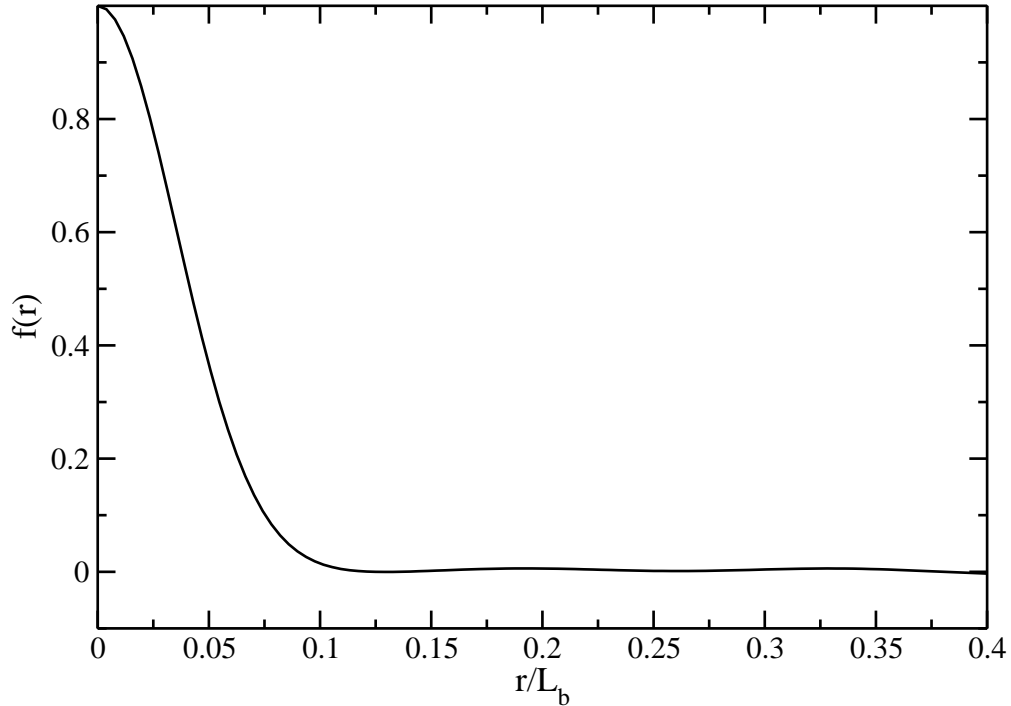


FIGURE 8.1 – Fonction $f(r)$ correspondant au spectre 8.8.

il faut que $f(r)$ s'annule pour $r \ll L_b/2$. Sur la figure 8.1, $f(r)$ s'annule pour $r/L_b = 0.1$, ainsi le domaine de calcul est suffisamment grand pour garantir qu'à une certaine distance, les champs de vitesse sont décorrélés.

Se pose maintenant le problème de la résolution spatiale. Comme les simulations numériques sont des DNS, toutes les échelles de la turbulence, y compris les échelles dissipatives, doivent être résolues. D’après l’étude de Yeung et Pope [172], une bonne résolution des échelles dissipatives est obtenue pour $k_{max}\eta_k \geq 1$ où k_{max} est le nombre d’onde maximum simulé. D’autres critères sont retrouvés dans la littérature. Par exemple, Balachandar [5] choisit le critère $k_{max}\eta_k \geq 1.5$ qu’il estime nécessaire pour prendre en compte la dissipation correctement. Dans notre travail, nous nous sommes fixés le critère de résolution le plus sévère, à savoir que le pas d’espace Δx doit au moins être égal à l’échelle spatiale de Kolmogorov η_k . Le nombre d’onde maximum simulé étant $k_{max} = \frac{2\pi}{L_b} \left(\frac{N}{2} - 1\right)$, si $\Delta x = \eta_k$, alors :

$$k_{max}\eta_k = \frac{2\pi}{L_b} \left(\frac{N}{2} - 1\right) \Delta x = \frac{2\pi}{L_b} \left(\frac{N}{2} - 1\right) \frac{L_b}{N} \sim \pi \quad (8.10)$$

où N est le nombre de points de la simulation. Sur le tableau 8.1, $\eta_k/\Delta x = 1.07$ pour un maillage de 512^3 et donc l’échelle de Kolmogorov est résolue dès l’instant initial. Comme η_k croît au cours du temps, on est assuré d’une très bonne résolution de toutes les échelles dissipatives.

Les plus petites échelles étant celles qui dissipent l’énergie cinétique, le bilan d’énergie aux petites échelles peut être perturbé par la dissipation numérique du schéma (ici les WENO). Une quantification de la dissipation numérique des schémas WENO a été réalisée par Couderc [26] sur une double couche de mélange périodique bidimensionnelle, dans le cas non visqueux. Les deux versions du schéma WENO conservative et non conservative sont comparées sur la figure 8.2. La perte d’énergie cinétique par dissipation numérique diminue lorsque la

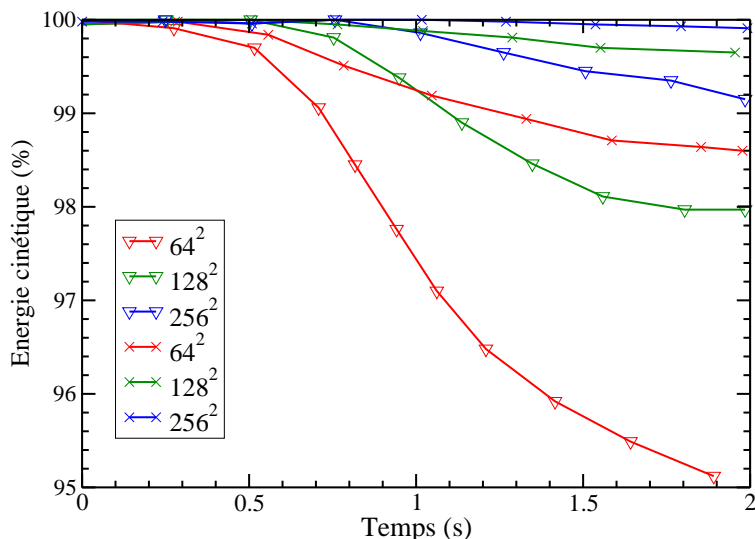


FIGURE 8.2 – Perte en énergie cinétique au cours du temps. Tiré de la thèse de Couderc [26]

résolution numérique augmente et une résolution de 256^2 est nécessaire pour qu’une perte inférieure à 0.2% sur l’énergie cinétique soit obtenue. La figure 8.2 montre aussi que la forme conservative des schémas WENO est moins dissipative que la forme non conservative nous incitant à utiliser la forme conservative des schémas WENO dans la suite du travail. Une étude similaire a été menée par Trontin [150] sur la configuration des tourbillons 2D

de Taylor-Green dans le cas non visqueux. Une résolution de 512^2 aboutit à une erreur relative inférieure à 10^{-5} sur l'énergie cinétique après 10 s. Pour quantifier la dissipation des schémas WENO d'ordre 5, Pirozzoli [111] définit une relation de dispersion approchée du schéma WENO. Il prend l'exemple de l'équation linéaire d'advection avec pour condition initiale une fonction sinusoidale monochromatique. La solution discrétisée au point j peut se mettre sous la forme $u_j(t) = \tilde{u}(t)e^{ijk\Delta x}$, où $\tilde{u}(t)$ est l'amplitude, k le nombre d'onde et Δx le pas spatial. L'amplitude complexe $\tilde{u}(t)$ se met sous la forme $\tilde{u}(t) = e^{-iA(t)\Phi(k\Delta x)}\tilde{u}_0$ où A est une fonction réelle de la seule variable t et \tilde{u}_0 est l'amplitude initiale. $\Phi(k\Delta x)$ est le nombre d'onde modifié associé à la discrétisation spatiale de l'équation d'advection. Les parties réelles et imaginaires de $\Phi(k\Delta x)$ sont représentées sur la figure 8.3. La partie réelle est

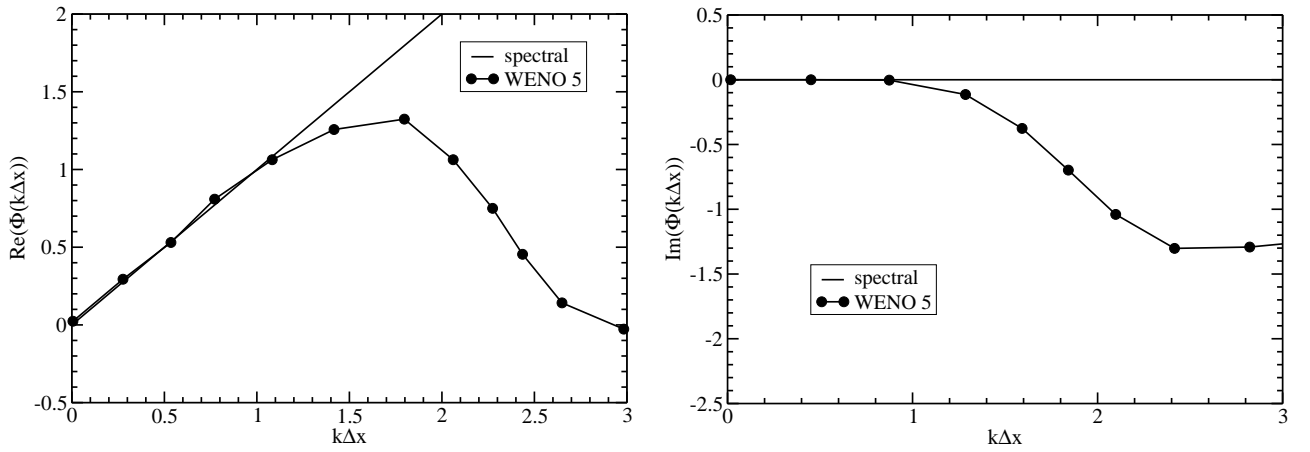


FIGURE 8.3 – Relation de dispersion approchée pour le schéma WENO au 5^{ème} ordre. Comparaison avec le schéma spectral. D'après Pirozzoli [111].

reliée aux propriétés de dispersion du schéma numérique. La partie imaginaire renseigne sur la dissipation numérique du schéma. La comparaison avec le schéma spectral est proposée. Aux basses fréquences (grandes longueurs d'onde), la dispersion et la dissipation visqueuses sont faibles. En revanche, aux hautes fréquences, pour les petites longueurs d'onde, le schéma WENO du 5^{ème} ordre est plus dispersif et plus dissipatif qu'un schéma spectral à maillage égal. Dans Mansour [92], le code utilisé est un code pseudo-spectral où les termes non-linéaires sont calculés dans l'espace physique. Le cas de simulation que nous avons choisi a une résolution pseudo-spectrale de 128^3 . Pour obtenir une résolution équivalente avec notre code, nous avons choisi une résolution de 512^3 , ce qui s'avère efficace, comme nous le montrerons par la suite.

La condition initiale a été présentée. Le champ de vitesse turbulent qui en découle est bien homogène, isotrope et à divergence nulle. Les échelles dissipatives, énergétiques et de la boîte sont bien séparées dans les limitations imposées par une D.N.S. correctement résolue. En effet, la D.N.S. limite la montée en Reynolds turbulent, ce qui limite forcément la séparation des échelles dissipatives et turbulentes (cf Eq. 1). D'ailleurs, la pente caractéristique en $-5/3$ n'est pas présente dans notre spectre initial du fait d'un Reynolds turbulent trop petit. La résolution de 512^3 offre une fermeture de toutes les échelles turbulentes. Dans la section suivante, nous réalisons la D.N.S. dont la condition initiale est donnée par le champ de T.H.I. précédemment présenté. La validation de cette D.N.S. est proposée.

8.2 DNS de la T.H.I. monophasique

La T.H.I. est simulée dans une boîte cubique de côté 2π . La résolution spatiale est de 512^3 et le pas de temps vaut $1/100$ de l'échelle temporelle de Kolmogorov. Le pas de temps peut paraître extrêmement restrictif, mais ceci est dû aux futures simulations diphasiques avec de fortes tensions de surface. Nous avons choisi le même pas de temps pour toutes les simulations qu'elles soient monophasiques ou diphasiques en gardant donc le pas de temps le plus restrictif. Si C_c , C_v , C_g et C_s sont les contraintes de stabilité CFL respectivement basées sur les termes convectifs, la diffusion visqueuse, les forces de volume (gravité) et la tension de surface, alors le pas de temps Δt est borné par la relation suivante :

$$\Delta t \leq \frac{1}{C_c + C_v + \sqrt{(C_c + C_v)^2 + 4(C_g^2 + C_s^2)}} \quad (8.11)$$

Voir la thèse de Couderc [26] pour une définition des termes C_c , C_v , C_g . Pour C_s , Kang [58] propose le critère suivant, basé sur la courbure κ :

$$C_s = \sqrt{\frac{\sigma \|\kappa\|_\infty}{\min(\rho_g, \rho_l) \min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)^2}} \quad (8.12)$$

En plus de la contrainte physique sur σ , les cas diphasiques présenteront de larges distorsions de l'interface, ce qui engendre de très fortes courbures locales et donc un C_s élevé. Ceci explique le besoin d'un pas de temps restrictif conservé pour toutes les simulations. Le *run* nécessite 24000 itérations sur 64 processeurs.

L'évolution de l'énergie cinétique k est représentée sur la figure 8.4. k_0 représente l'énergie

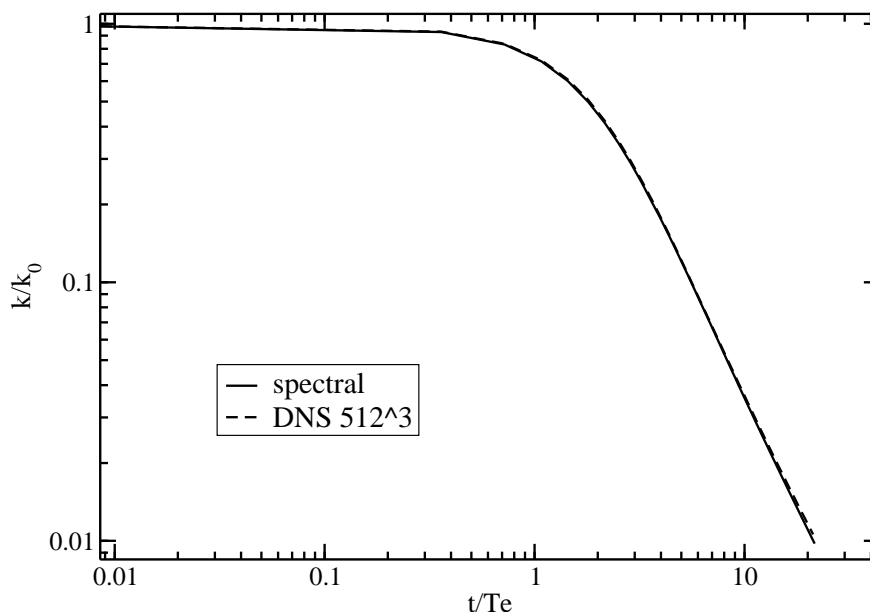


FIGURE 8.4 – Evolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente.

cinétique turbulente à l'instant initial. Une comparaison est menée entre notre code DNS 512^3 et un code spectral 128^3 . Les deux courbes sont confondues, ce qui montre que l'on atteint la

précision spectrale pour les simulations de notre code DNS lorsque la discrétisation spatiale est de 512^3 points. Après un régime transitoire ($t/T_e \geq 2$), l'énergie cinétique décroît selon une loi en puissance dont l'exposant vaut -1.72 . Sur la figure 8.5, le taux de dissipation visqueuse ϵ est représenté en fonction du temps. Encore une fois, notre code DNS 512^3 est

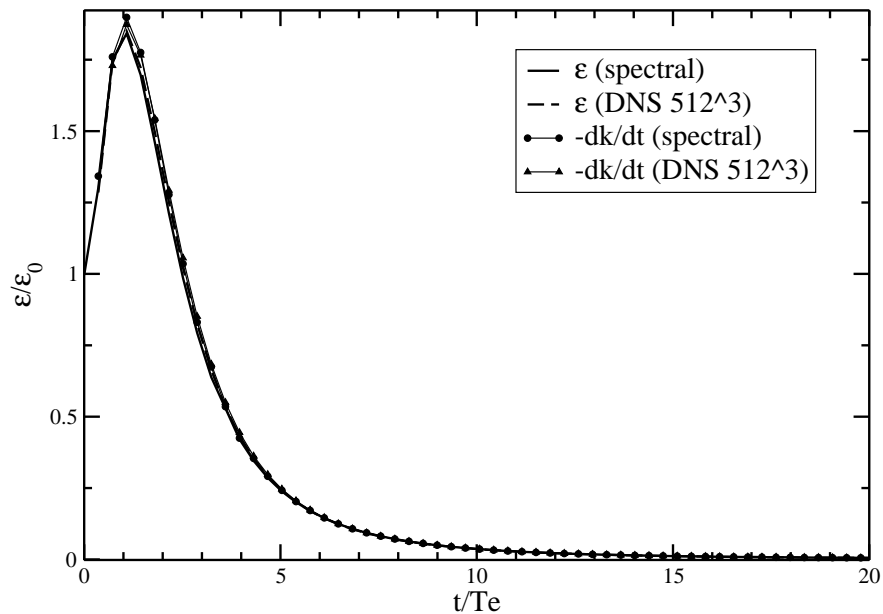


FIGURE 8.5 – Evolution temporelle du taux de dissipation visqueuse ϵ de l'énergie cinétique turbulente k .

comparé au code spectral 128^3 et les évolutions sont semblables. Ceci témoigne d'une bonne résolution des petites échelles de la turbulence puisque ce sont elles qui dissipent l'énergie. Sur la figure 8.5, ϵ augmente aux temps courts ($t/T_e = 0$ à 1). Comme le montre Yu [175], cette augmentation de ϵ est cohérente avec la physique de la turbulence. En effet, aux temps courts, l'énergie est redistribuée vers les grands nombres d'onde du fait de la cascade énergétique non linéaire. Ce phénomène induit une augmentation du taux de dissipation visqueuse dans l'espace physique. Pour des temps plus longs (après un temps de retournement), le taux de dissipation décroît de façon monotone. Ainsi la résolution de 512^3 est suffisante pour résoudre les échelles dissipatives. La précision est même spectrale. L'équation de l'énergie cinétique

turbulence k s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial k}{\partial t} + \underbrace{\langle U_i \rangle \frac{\partial k}{\partial x_i}}_{\text{convection}} &= - \underbrace{\langle u_i u_j \frac{\partial \langle U_i \rangle}{\partial x_j} \rangle}_{\text{production}} \\
 &\quad - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\langle u_j k \rangle + \langle \frac{u_j}{\rho} p \rangle \right)}_{\text{diffusion turbulente}} \\
 &\quad + \underbrace{\nu \langle \frac{\partial^2 k}{\partial x_j^2} \rangle}_{\text{diffusion visqueuse}} \\
 &\quad - \underbrace{\nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{\text{dissipation}}
 \end{aligned} \tag{8.13}$$

Sur la figure 8.5, les termes ϵ (qui correspond au terme de dissipation dans l'équation 8.13) et $\frac{\partial k}{\partial t}$ sont représentés. On en tire que $\frac{dk}{dt} = -\epsilon$ et ainsi les termes de convection, de production et diffusifs de l'équation 8.13 sont nuls. La nullité des termes de convection et de production implique que le champ moyen reste nul au cours du temps. La nullité des termes diffusifs au cours du temps montre que l'écoulement reste homogène. Ainsi, les hypothèses de THI restent bien valables pour toute la simulation de l'écoulement monophasique et l'équation 8.13 se résume alors en :

$$\frac{dk}{dt} = -\epsilon \tag{8.14}$$

L'évolution de ϵ est parfois modélisée par l'équation suivante :

$$\frac{d\epsilon}{dt} = -C_2(Re_\lambda)\epsilon^2/k \tag{8.15}$$

où C_2 est une constante qui dépend du Reynolds turbulent à déterminer. L'énergie cinétique turbulente k décroît selon une loi en puissance en t^{-n} avec $n = 1.72$, et alors, la constante C_2 est donnée par $C_2 = \frac{n+1}{n} = 1.58$. La constante C_2 est retrouvée sur la figure 8.6 où le rapport $\frac{d\epsilon/dt}{\epsilon^2/k}$ est tracé en fonction du temps. Un premier résultat dû à Kolmogorov [63] fournit dans le cas d'un Reynolds turbulent infini $C_2 = 1.7$. Mansour [92] montre que cette constante C_2 dépend de Re_λ et qu'aux petits Reynolds la constante C_2 diminue jusqu'à la limite $C_2 = 1.4$ pour $Re_\lambda = 0$. Notre constante $C_2 = 1.58$ sous-estime légèrement la valeur de référence $C_2 = 1.7$, mais ceci est cohérent avec l'observation de Mansour pour les faibles nombres de Reynolds.

La croissance de la turbulence peut être caractérisée par des moments d'ordre supérieur. On définit les nombres de skewness et de flatness [112] par :

$$S = \frac{1}{3} \frac{\overline{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right)^3}}{\overline{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right)^2}^{3/2}} \tag{8.16a}$$

$$F = \frac{1}{3} \frac{\overline{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right)^4}}{\overline{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right)^2}^2} \tag{8.16b}$$

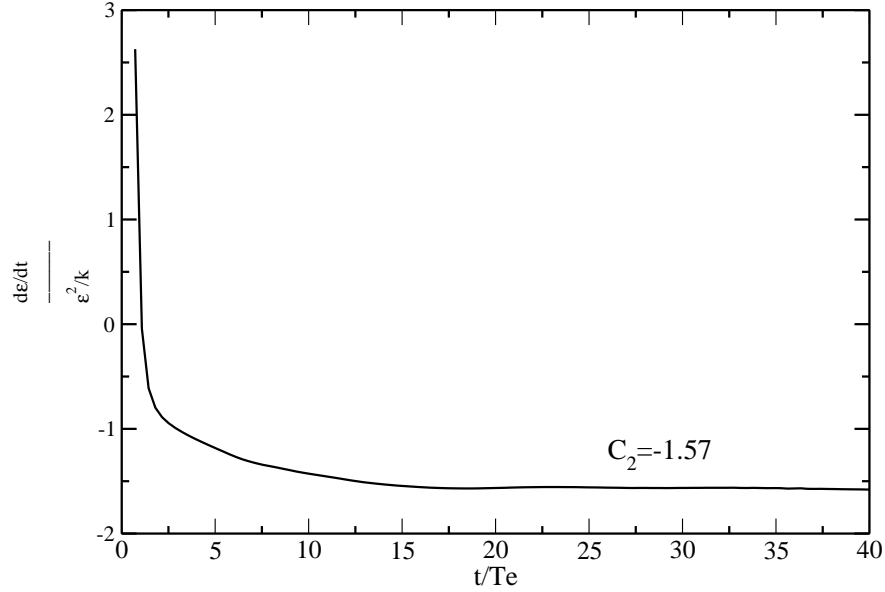


FIGURE 8.6 – Constante C_2 pour la modélisation de l'évolution de ϵ . Représentation du rapport $\frac{\frac{\partial \epsilon}{\partial t}}{\epsilon^2/k}$.

S et F représentent respectivement les moments du 3^{ème} et du 4^{ème} ordres des dérivées spatiales de la vitesse turbulente u' . Plusieurs études [99, 135] montrent que la turbulence peut être considérée comme pleinement développée lorsque $-0.5 \leq S \leq -0.4$ et $3.3 \leq F \leq 4$. L'évolution temporelle du skewness et du flatness est représentée sur la figure 8.7. Dans notre cas, la turbulence peut être considérée comme pleinement développée après trois temps de retournement. Dans [92], Mansour montre que le skewness dépend fortement de Re_λ pour $Re_\lambda \leq 5$ où le skewness s'effondre à la limite $Re_\lambda \rightarrow 0$. Le nombre de Reynolds Re_λ diminue au cours du temps et dans notre cas Re_λ est minoré par 9 tout au long de la simulation. Ainsi le skewness est assez peu influencé par l'évolution du nombre de Reynolds turbulent et une turbulence pleinement développée est garantie sur les 40 temps de retournement de la simulation. La figure 8.8 représente quelques vortex cores présents à $t = 0$. Les vortex cores sont les points où la vitesse et la vorticit  sont colin aires. Autrement dit, les vortex cores repr sentent les lignes o  s'enroulent les tourbillons. Ces tourbillons sont r partis de fa on homog ne et aucune direction n'est privil gi e. Il n'y a donc aucune direction d'anisotropie pour la turbulence.

Sur la figure 8.9, les spectres d' nergie 3D sont repr sent s   deux temps diff rents. Une comparaison est men e entre le code DNS spectral 128^3 et notre code DNS 512^3 . Les nombres d'onde sont repr sent s jusqu'  $k\eta_k = 2$. La pr cision spectrale de notre DNS 512^3 est obtenue   toutes les  chelles, et notamment aux  chelles dissipatives $k\eta_k \geq 1.5$, m me aux grands temps de simulation. Notre travail va mettre en avant un transfert d' nergie entre les  chelles de la turbulence et celle des effets capillaires. Il est donc indispensable que les plus petites  chelles soient ferm es pour une analyse de ce transfert. La figure 8.9 indique une bonne r solution des  chelles dissipatives avec une r solution de 512^3 .

Dans les parties pr c dentes, il a  t  montr  que le domaine de calcul doit contenir au moins 8  chelles int grales pour garantir la d corr lation des champs. La figure 8.10

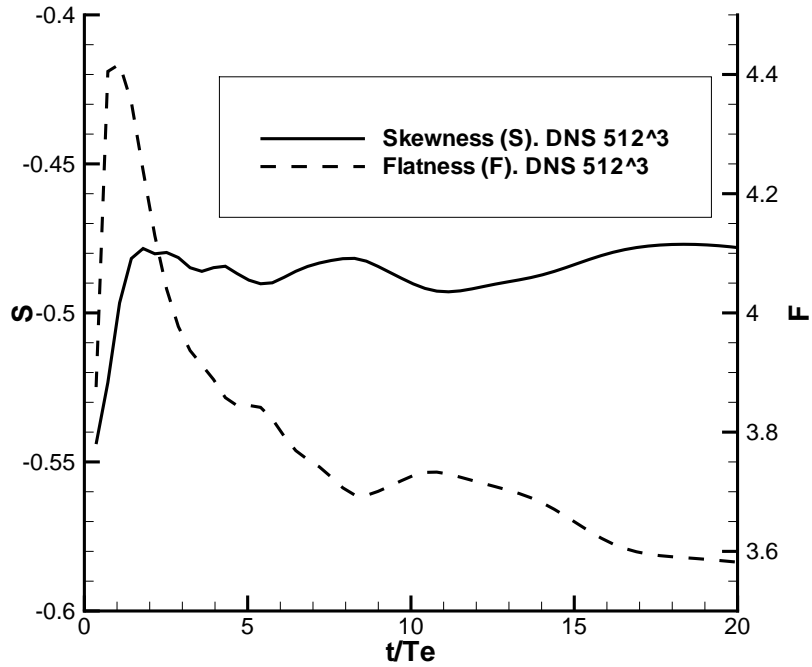


FIGURE 8.7 – Skewness et flatness en fonction de t/T_e

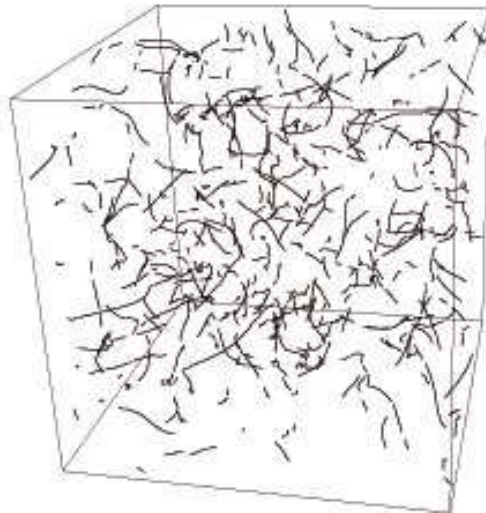


FIGURE 8.8 – Vortex cores de la T.H.I. monophasique à $t/T_e = 0.3$

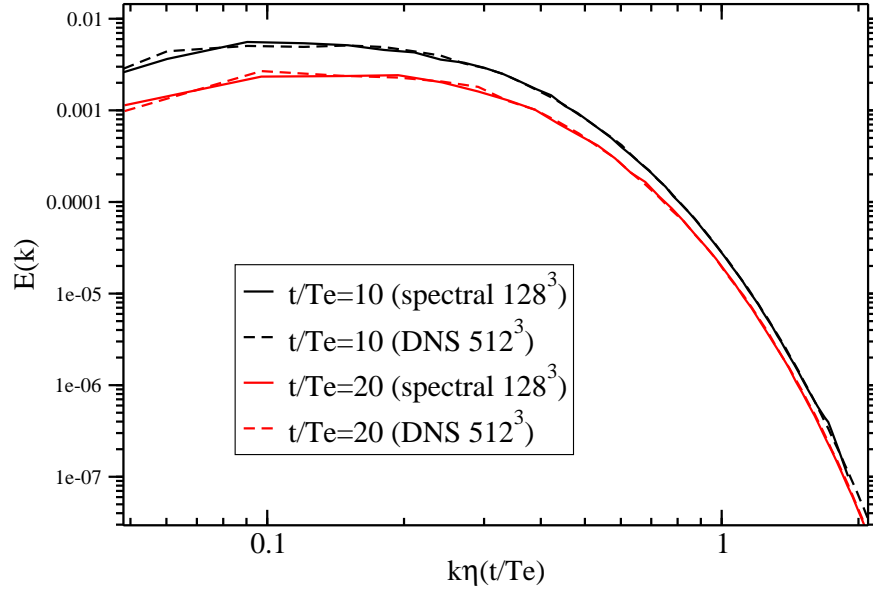


FIGURE 8.9 – Spectres d’énergie à deux $\frac{t}{T_e}$ différents. Comparaison entre le code spectral 128^3 et le code DNS 512^3 .

représente l’évolution temporelle des différentes échelles de longueur. Cette figure montre que la dimension de la boîte fait au moins 8 fois la taille de Λ_f pour $t/T_e \leq 37$. Ainsi, la décorrélation des champs est garantie pour toute la simulation numérique. L’échelle de Taylor λ croît au cours du temps mais moins rapidement que l’intensité turbulente ne décroît. Ainsi le Reynolds turbulent Re_λ décroît au cours du temps. Comme ϵ décroît au cours du temps, l’échelle de Kolmogorov η_k augmente avec le temps et ainsi la simulation est de mieux en mieux résolue.

8.2.1 Problématiques liées aux DNS hautement résolues

La résolution de DNS hautement résolues nécessite l’utilisation d’un code de calcul parallélisé. Le code utilisé dans ce travail est celui développé par F. Couderc [26] et il a été montré que le temps de communication inter processeurs reste inférieur au temps de calcul si les blocs de calculs ont une taille minimum de 64^3 . Pour des blocs plus petits, le code passe plus de temps à échanger des informations entre processeurs voisins qu’à calculer les champs. Ainsi, pour nos simulations 512^3 , on peut utiliser jusqu’à 512 processeurs.

Pour le calcul du champ de vitesses turbulent initial, des transformées de Fourier sont nécessaires pour effectuer la bijection de l’espace spectral vers l’espace physique. Pour une résolution de 512^3 , une DFT (Direct Fourier Transform) naïve nécessite $512^6 \sim 10^{16}$ opérations, ce qui est évidemment absolument irréalisable en temps réel. En effet, des calculs de transformées de Fourier sont nécessaires tout au long du calcul pour construire le spectre d’énergie à partir du champ de vitesses réelles. Et comme il faut trois transformées pour le calcul de $E(k)$, une alternative aux DFT est indispensable. Tout d’abord, les DFT sont remplacées par des FFT. Voir annexe A pour une présentation de la FFT. En effet, la multiplicité tombe à $\mathcal{O}(N \ln N)$ où N est le nombre de points. La FFT tridimensionnelle est certes très efficace, mais reste néanmoins coûteuse si elle n’est réalisée que par un seul processeur avec une résolution de 512^3 . De plus, l’opération de FFT réalisée sur un seul processeur vient

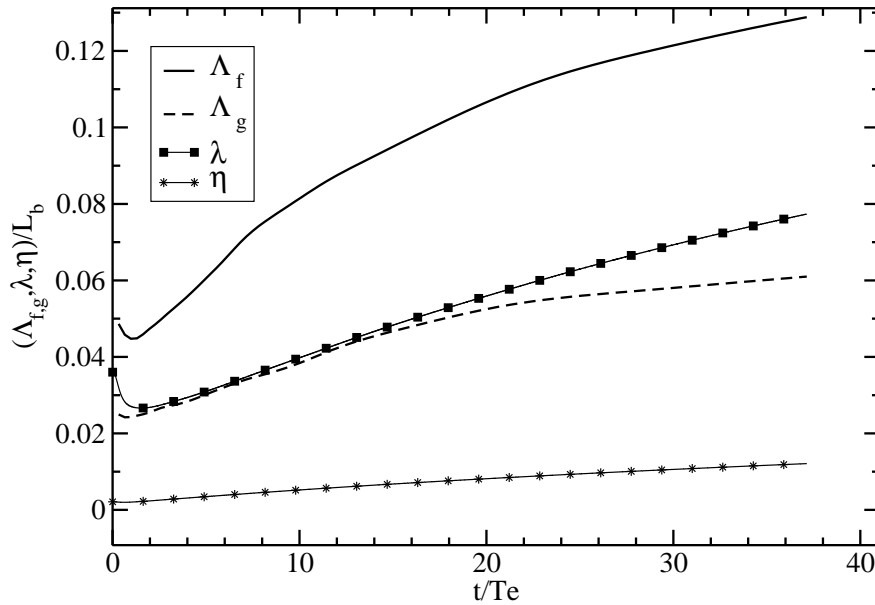


FIGURE 8.10 – Evolution temporelle des échelles de longueur.

anéantir les performances du code. En effet, si le processeur 0 est chargé de faire la FFT, alors toutes les variables de tous les processeurs doivent être communiquées préalablement au processeur 0. Ce qui signifie une utilisation de mémoire gigantesque pour le processeur 0. De plus, lorsque le processeur 0 fait le calcul de la FFT, tous les autres processeurs sont à l'arrêt et attendent la fin du travail du processeur 0. Cette débauche de mémoire et de CPU n'est pas acceptable pour des résolutions de 512^3 (et même, tout simplement, les machines refusent parfois l'allocation de mémoire dont le processeur 0 a besoin). Il a donc fallu utiliser la FFT parallélisée. Lorsque l'on a une FFT programmée en séquentiel, il est très simple de la paralléliser. Les méthodes les plus courantes consistent à décomposer la FFT 3D en trois FFT 1D :

$$\hat{f}(l, m, n) = \underbrace{\sum_{i=-N_x/2}^{N_x/2-1} \sum_{j=-N_y/2}^{N_y/2-1} \sum_{k=-N_z/2}^{N_z/2-1} f(i, j, k) \exp\left(-\frac{2i\pi}{N_z}kn\right)}_{\text{1ère FFT 1D suivant z}} \underbrace{\exp\left(-\frac{2i\pi}{N_y}jm\right)}_{\text{2ème FFT 1D suivant y}} \underbrace{\exp\left(-\frac{2i\pi}{N_x}il\right)}_{\text{3ème FFT 1D suivant x}} \tag{8.17}$$

Deux méthodes de calcul de la FFT 3D parallélisée peuvent être mises en œuvre.

Découpage par plan

L'espace est divisé en plans selon une direction (disons \mathbf{e}_z par exemple). Chaque processeur reçoit plusieurs de ces plans et réalise des FFT 2D dans chacun des plans. Après une réorganisation des données entre les processeurs, une FFT 1D est réalisée dans la direction restante.

Découpage par sticks

L'espace est divisé en sticks et chaque processeur reçoit plusieurs sticks et réalise des FFT 1D dans la première direction. Puis les données sont réorganisées entre les processeurs pour réaliser une FFT 1D dans la deuxième direction. Après une dernière réorganisation des données entre les processeurs, la FFT 1D dans la direction restante est faite par chaque processeur.

Ces deux techniques sont simples d'implémentation lorsque les techniques MPI sont bien connues. Et elle sont très efficaces. Mais elles ont le désavantage de proposer une distribution des données sur les processeurs selon une topographie qui n'est pas forcément celle adoptée pour résoudre les équations de Navier-Stokes. La géométrie de nos blocs de calcul Navier-Stokes ne coïncide pas avec une répartition en plans ou en sticks adaptée pour la FFT parallélisée. Nous avons donc choisi de développer une technique de parallélisation de la FFT où les blocs coïncident avec ceux utilisés pour résoudre Navier Stokes. Pour expliquer notre méthode, nous choisissons le cas 1D dans un souci de simplification. La FFT 1D s'écrit alors :

$$\hat{f}(m) = \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} f(j) e^{-\frac{2i\pi}{N}jm} \quad m = -N/2 \dots N/2 - 1 \quad (8.18)$$

On considère que l'intervalle $[-N/2; -N/2 - 1]$ est découpé par p processeurs indexés de 0 à $p - 1$. On appelle S_k l'intervalle supporté par le processeur k .

$$S_k = \left\{ -\frac{N}{2} + k\frac{N}{p}, \dots, -\frac{N}{2} + (k+1)\frac{N}{p} - 1 \right\} \quad k = 0, \dots, p-1 \quad (8.19)$$

On pose alors $a_k = -\frac{N}{2} + k\frac{N}{p}$ et $b_k = -\frac{N}{2} + (k+1)\frac{N}{p} - 1$ de telle sorte que $S_k = [[a_k \dots b_k]]$. On a alors : $[-N/2; -N/2 - 1] = \bigcup_{k=0, p} S_k$.

Ainsi, le processeur r réalise la FFT suivante :

$$\hat{f}(m) = \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} f(j) e^{-\frac{2i\pi}{N}jm} \quad m \in S_r \quad (8.20)$$

Cette formule peut être réécrite comme :

$$\hat{f}(m) = \sum_{k=0}^{p-1} \sum_{j=a_k}^{b_k} f(j) e^{-\frac{2i\pi}{N}jm} \quad m \in S_r = [[a_r \dots b_r]] \quad (8.21)$$

On réécrit l'équation précédente en utilisant la transformation suivante :

$$\begin{aligned} a_r &\leq m \leq b_r \\ a_r + (a_k - a_k) &\leq m \leq b_r + (b_k - b_k) \\ a_k + (a_r - a_k) &\leq m \leq b_k + (b_r - b_k) \end{aligned} \quad (8.22)$$

$a_r - a_k = b_r - b_k = L_{rk}$ représente la distance entre les premières bornes des intervalles S_k et S_r .

$$e^{-\frac{2i\pi}{N}jm} = e^{-\frac{2i\pi}{N}j(m-L_{rk})} e^{-\frac{2i\pi}{N}jL_{rk}}$$

Chapitre 8. T.H.I. monophasique : génération et validation

On pose alors : $\tilde{f}(j) = f(j) e^{-\frac{2i\pi}{N}jL_{rk}}$ et alors l'équation 8.21 se réécrit :

$$\hat{f}(m) = \sum_{k=0}^{p-1} \underbrace{\sum_{j=a_k}^{b_k} \tilde{f}(j) e^{-\frac{2i\pi}{N}j(m-L_{rk})}}_{\text{FFT 1D du processeur k}} \quad m \in S_r = [[a_r \dots b_r]] \quad (8.23)$$

Dans la deuxième sommation, on retrouve la FFT 1D effectuée par le processeur k . En effet, $m - L_{rk}$ décrit l'intervalle S_k quand m décrit l'intervalle S_r (cf Eq. (8.22)). Pour retrouver $\hat{f}(m)$, une sommation collective sur tous les processeurs est opérée. Au final, chaque processeur effectue p FFT. Chaque processeur apporte sa contribution pour le calcul de chaque nombre d'onde. Comme les nombres d'ondes sont répartis sur tous les processeurs, ceci explique que chaque processeur doive calculer p FFT.

En termes de multiplicité, nous allons raisonner en 3D et prendre en compte des DFT. Sur un seul processeur, la multiplicité de la DFT est N^6 où N est le nombre de points par dimension (N^3 points au total en 3D). S'il y a p processeurs, chaque processeur travaille avec N^3/p points. La multiplicité de la DFT par processeur est donc de N^6/p^2 . Comme chaque processeur fait p DFT, alors la multiplicité de l'opération totale de DFT est N^6/p . Ainsi, rien que sur les DFT, le gain de la DFT parallélisée par rapport à la DFT séquentielle est linéaire. Nous avons travaillé avec 64 processeurs. Ainsi le gain est de plus d'un ordre de grandeur. Dans notre calcul de multiplicité, nous avons négligé les communications MPI entre blocs. Le temps de communication est négligeable par rapport au temps de calcul.

Ainsi, nous avons programmé un algorithme de FFT 3D parallélisée qui permet un calcul des spectres d'énergie en temps réel.

Chapitre 9

Interaction d'une nappe avec le champ de THI

Sommaire

9.1	Configuration	155
9.2	Interaction interface/turbulence : Résultats généraux	156
9.2.1	Analyse qualitative	156
9.2.2	PDF de la distribution des tailles de gouttes	156
9.2.3	Bilan d'énergie cinétique	160
9.2.4	Evolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente : influence du nombre de Weber	163
9.3	Statistiques sur la turbulence. Réorganisation intercomposantes de l'énergie cinétique turbulente	165
9.3.1	Analyse aux temps courts des tensions de Reynolds $t/T_e \leq 2$	169
9.3.2	Analyse aux temps longs des tensions de Reynolds $t/T_e \geq 5$	172
9.4	Spectres d'énergie 3D	173
9.5	Prise en compte de la distance à l'interface et spectres d'énergie 2D	178

Maintenant que le champ de THI monophasique est bien calibré, une étude diphasique est menée dans laquelle une nappe interagit avec le champ turbulent de THI. Les DNS de l'interaction interface/turbulence sont relativement récentes [69, 70] et généralement limitées à la configuration de surface libre où les effets de la phase gazeuse sur la phase liquide est négligée et remplacée par l'approximation de surface libre plane parfois combinée avec une contrainte de cisaillement. La turbulence en surface libre en canal ouvert a été étudiée pour la première fois par Lam et Banerjee [69, 70]. Lombardi *et al.* [86] réalisent une DNS d'un écoulement gaz-liquide à contre-courant dans un canal avec une condition de glissement aux parois. L'interface entre les deux phases est maintenue plane, ce qui correspond à une tension de surface infinie. Il est montré que les caractéristiques de la turbulence de la phase gazeuse sont similaires à celles d'une configuration de paroi solide. La phase gazeuse (phase la moins dense) "voit" l'interface comme une paroi solide. Plus tard, Handler *et al.* [46] mènent des DNS similaires. Dans ces simulations, la surface libre est considérée comme une paroi rigide glissante et le mouvement vertical de la surface libre est négligé. Les vraies conditions de surface libre sont intégrées dans les travaux de Komori [64]. Mais ce travail est encore restreint

aux déformations interfaciales de petites amplitudes. Un modèle d'ondes de surfaces générées par un courant d'air cisailant est proposé par Borue *et al.* en étudiant l'influence de l'application d'un cisaillement sur la surface libre. Angelis [3] étudie des interfaces non planes dans le cas d'écoulement stratifié avec une interface libre de se déformer dans le régime d'ondes capillaires. Fulgosi [40] réalise des DNS de turbulence dans le cas d'écoulements air/eau à contre-courant où les phases sont séparées par une interface déformable. Les résultats de ce travail ne diffèrent guère de ceux obtenus précédemment (Lombardi *et al.* [86]). Les intensités turbulentes, les bilans sur les contraintes de Reynolds et les structures de l'écoulement pour la phase gazeuse montrent des similarités avec les résultats issus d'un écoulement en canal ouvert. Dans Banerjee [6], les vitesses de frottement sont considérablement augmentées afin de générer des déformations interfaciales de plus grand nombre d'onde, sans toutefois parvenir à la cassure de l'interface. Il est alors montré (Banerjee [6]) que lorsque le taux de cisaillement imposé par la phase gazeuse est grand, alors de la turbulence est générée proche de l'interface. In [68], la D.N.S. d'un écoulement gaz/liquide stratifié avec une interface cisailée conclut en la nécessité d'adapter le comportement asymptotique de la turbulence près des interfaces (comme dans le cas des écoulements avec paroi). La première fonction d'amortissement pour la turbulence à proximité des interface (du côté de la phase gazeuse) a été proposée dans ces travaux [68]. Dans toutes ces études, la déformation de l'interface reste modérée et les forts changements topologiques comme la fragmentation où la séparation d'interface sont exclus.

Plus récemment, des travaux ont été menés où la fragmentation et le breakup sont pris en compte dans le contexte de DNS d'écoulements diphasiques à phases séparées. Bunner et Tryggvason [18] étudient l'effet de la déformation d'une bulle sur les propriétés des écoulements turbulents à bulles. Dans leurs simulations, la turbulence est produite par le sillage des bulles. Cette "pseudo-turbulence" générée par la montée d'une bulle n'a pas les mêmes propriétés qu'une turbulence dont le spectre contient une zone inertielle bien définie. Peu de DNS de bulles déformables dans un canal turbulent ont été menées. Parmi ces études, Kawamura [60] réalise de telles DNS où une méthode de front-tracking est utilisée pour l'interface. Des modifications dans les profils d'intensités de la turbulence sont observées. Dans Liovic *et al.* [80], la LES de l'injection constante d'air dans de l'eau est étudiée, ce qui induit des bulles en régime turbulent. Une corrélation forte entre la turbulence et les déformations interfaciales a été mise en évidence. Dans des travaux plus récents, Toutant [149] réalise la DNS de l'évolution d'une bulle déformable (mais sans rupture) dans une turbulence décroissante dans le but d'une étude *a priori* pour une modélisation LES pour les écoulements diphasiques avec interface. Dans [81], Liovic développe une nouvelle approche L.E.S. pour les écoulements avec interface basée sur un traitement multi-physique au voisinage des interfaces déformables. Une fonction distance reconstruite est introduite à partir de laquelle une vitesse de cisaillement interfaciale est définie pour être utilisée dans les modèles de transport de proche interface. Cette méthodologie [81] a été appliquée à la simulation d'une brisure de vagues.

Les travaux précédemment cités ont l'inconvénient de traiter :

- soit un régime pleinement turbulent mais où l'interface se déforme peu
- soit une interface avec de plus larges déformations. Mais la turbulence n'est pas pleinement développée

Dans tous les cas, les comportements extrêmes de fragmentation ou breakup de l'interface ne sont pas étudiés. Dans notre travail de thèse, une interface évolue dans un champ turbulent décroissant. Ici, l'interface est très largement déformée. Les deux phases sont résolues par

DNS.

9.1 Configuration

Une interface plane est introduite dans le champ de THI présenté précédemment à $t = 0$. La nappe sépare le domaine de calcul en deux parties égales. L'épaisseur de la nappe est de 5% de la taille de boîte. La configuration est présentée sur la figure 9.1. La nappe initiale

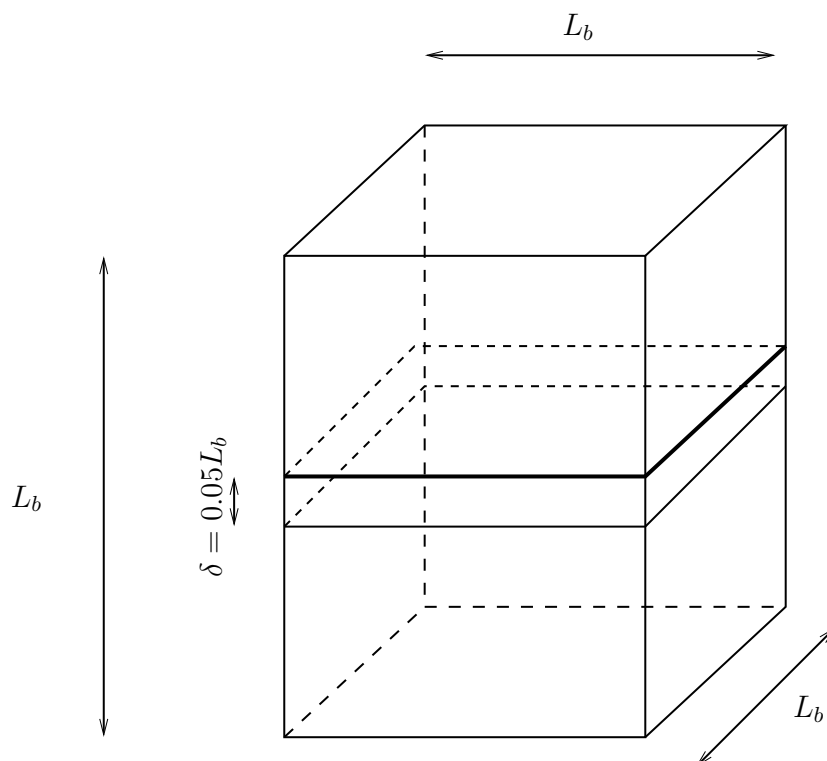


FIGURE 9.1 – Configuration initiale de la nappe dans le champ THI. $t/T_e = 0$.

contient 25 noeuds de calcul soit environ 25 échelles spatiales de Kolmogorov. Le but de notre travail est d'étudier l'interaction entre la turbulence et les forces interfaciales sans autres influences, comme la gravité par exemple. En effet, les résultats DNS présentés ici ont pour but d'être filtrés pour une analyse *a priori* du phénomène d'atomisation où la gravité peut être négligée. Les sauts de densité et visqueux ne sont pas pris en compte, de telle sorte que $\rho_1/\rho_2 = 1$ et $\mu_1/\mu_2 = 1$ où 1 et 2 désignent ici les deux phases (celle représentée par la nappe au centre de la boîte et celle représentée par l'écoulement turbulent autour). Une étude paramétrique est réalisée sur le coefficient de tension de surface σ . Dans cette étude, le nombre sans dimension pertinent est le nombre de Weber. Il est donné dans notre étude par :

$$We_e = \frac{\rho u'_0 \delta}{\sigma} \quad (9.1)$$

où $u'_0 \equiv \sqrt{\langle u'^2(t) \rangle_{t=0}}$ est la fluctuation de vitesse moyenne issue de l'énergie cinétique turbulente initiale et δ l'épaisseur initiale de la nappe. Ainsi le nombre de Weber est défini selon les échelles initiales de la vitesse et de longueur. En effet, il est très difficile de trouver

une longueur caractéristique de l'interface au cours du temps puisque l'interface se déforme sur une gamme d'échelles très large. En plus, l'absence de gravité nous défend d'utiliser l'échelle de longueur capillaire comme échelle de longueur. Il s'est avéré que l'utilisation de l'épaisseur initiale de la nappe comme échelle de longueur caractéristique pour le nombre de Weber s'avère efficace. En effet, des comportements différenciés en fonction de nombre de W_e différents ont été observés. δ et u'_0 n'apparaissent pas comme des échelles aberrantes pour caractériser la physique et permettent d'isoler des plages de nombres de Weber où les comportements physiques sont similaires.

L'étude paramétrique a été réalisée pour différents nombres de Weber : 110, 63, 19, 2, 1, 0.2 et 0.05. Le cas de référence est la THI sans interface. Ce cas est équivalent à une nappe où $\sigma = 0$, et la nappe se comporte juste comme un marqueur lagrangien. C'est pourquoi le cas de référence sera noté $W_e = \infty$.

9.2 Interaction interface/turbulence : Résultats généraux

9.2.1 Analyse qualitative

On s'intéresse, dans un premier temps, au mécanisme de l'interaction en analysant les changements topologiques de l'interface. Les nappes sont représentées sur la figure 9.2 pour quatre nombres de Weber initiaux différents, à trois instants différents. Pour les grands nombres de Weber (petites tensions de surface), l'interface est fortement étirée par l'écoulement dans lequel elle évolue. C'est l'énergie cinétique turbulente qui permet cet étirement. Des filaments et des petites structures apparaissent. Quand le temps augmente, ces structures deviennent plus grosses et leurs formes tendent à devenir sphériques. Ceci est dû aux forces capillaires dont l'importance relative croît au cours du temps. En effet, les forces capillaires sont proportionnelles à σ qui est constant au cours du temps et à la courbure κ qui a tendance à augmenter au cours du temps (les structures sont de plus en plus étirées faisant apparaître de fortes courbures). En revanche, l'intensité turbulente décroît au cours du temps par dissipation visqueuse. Ainsi la contribution relative des forces capillaires augmente avec le temps ce qui explique la forme sphérique des petites structures.

Pour les petits nombres de Weber (fortes tensions de surface), l'interface initialement plane est à peine perturbée. Dans ce cas, aucun étirement ni déchirement de l'interface n'est observé. A partir de ces considérations qualitatives, il semble qu'à grand nombre de Weber, l'interface produit des gouttelettes, ce qui est consistant avec la formation préalable de filaments. En revanche, aux petits nombres de Weber, la nappe reste plane, ce qui tente à penser qu'il existe un nombre de Weber critique en dessous duquel il n'y a pas de fragmentation. Ce nombre de Weber critique se situe entre 0.2 et 1.

9.2.2 PDF de la distribution des tailles de gouttes

Comme l'interface pour les plus grands nombres de Weber est fortement divisée, on peut se demander si la simulation est vraiment D.N.S. du point de vue de l'interface. Pour répondre à cette question, les PDF du nombre de gouttelettes en fonction de leurs diamètres $D/\Delta x$ sont représentées pour trois Weber différents ($W_e = 110$, $W_e = 19$ et $W_e = 2$) et à différents instants sur les figures 9.3, 9.4 et 9.5. D est le diamètre de la gouttelette et

9.2 Interaction interface/turbulence : Résultats généraux

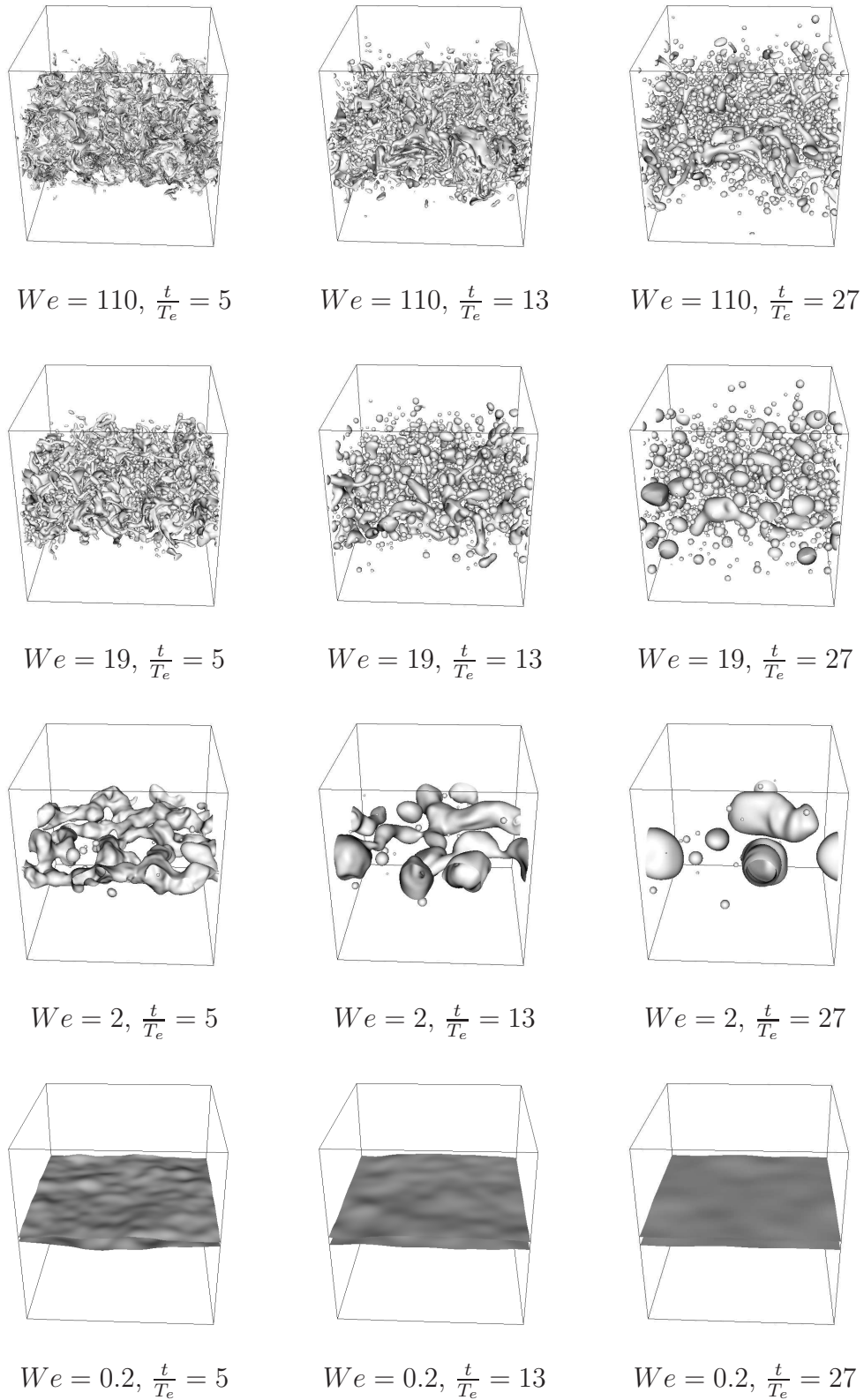


FIGURE 9.2 – Nappes représentées pour quatre We_e différents et à trois instants différents.

Δx le pas d'espace. Pratiquement, le diamètre D est calculé par $D = \left(\frac{6V}{\pi}\right)^{1/3}$ où V est le volume de chaque gouttelette détectée par un algorithme de reconstruction géodésique [125]. Voir l'annexe B pour le détail de l'extraction des composantes connexes par arc (ici, les gouttelettes).

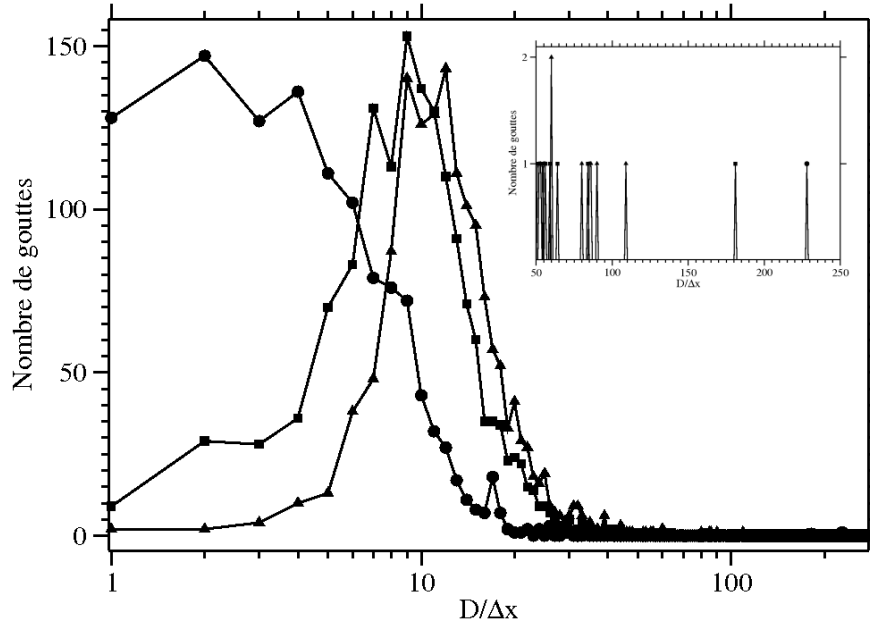


FIGURE 9.3 – PDF du nombre de gouttelettes en fonction de leur diamètre D . Δx est le pas d'espace. $W_e = 110$. \bullet : $t/T_e = 5$; \blacksquare : $t/T_e = 13$; \blacktriangle : $t/T_e = 27$

Sur les figures 9.3, 9.4 et 9.5, un zoom est effectué pour $50 \leq D/\Delta x \leq 250$ et le résultat est visible dans la partie droite supérieure de la figure. Aux temps courts ($t/T_e \leq 5$) et pour $W_e = 110$ et $W_e = 19$ (Figures 9.3 et 9.4), les PDF observent un maximum pour $1 \leq D/\Delta x \leq 20$, ce qui indique une fragmentation de la nappe après la formation des ligaments. Cependant, comme on peut le voir sur les zooms des figures 9.3 et 9.4, la plus grande composante par arcs est encore présente à cet instant. Son diamètre équivalent décroît de 234 à 230 pour $W_e = 110$ et de 234 à 220 pour $W_e = 19$. Aux temps plus longs, la coalescence apparaît, comme on peut le voir sur les figures 9.3 et 9.4. Pour ces nombres de Weber, le plus grand nombre de gouttelettes est observé pour $D/\Delta x = 10$ à $t/T_e = 13$, au lieu de $D/\Delta x = 3$ à $t/T_e = 5$ pour $W_e = 110$, et au lieu de $D/\Delta x = 7$ à $t/T_e = 5$ pour $W_e = 19$. Pour $t/T_e > 13$, les PDF n'évoluent plus. Pour le Weber plus petit ($W_e = 2$), le processus de fragmentation s'opère mais ne résulte pas en une large distribution de gouttelettes plus petites. Au contraire, la composante connexe par arcs principale est divisée en grosses gouttes. Pour ce cas ($W_e = 2$), la coalescence apparaît plus tard ($t/T_e = 27$) et est moins significative. A cet instant, trois grosses gouttes sont présentes : $D/\Delta x = 130, 160$ et 180 .

Comme on peut le voir sur les figures 9.3, 9.4 et 9.5, deux comportements distincts sont observés avec une PDF centrée sur $D/\Delta x = 10$ pour les grands W_e , alors que seulement trois grosses gouttes sont visibles pour $W_e = 2$. Pour les plus grands nombres de Weber ($W_e \geq 19$) et pour $t/T_e \geq 13$, nous avons $D/\Delta x \geq 5$ pour la grande majorité des gouttelettes, ce qui indique la bonne résolution spatiale des gouttelettes et ainsi la qualité des D.N.S. réalisées.

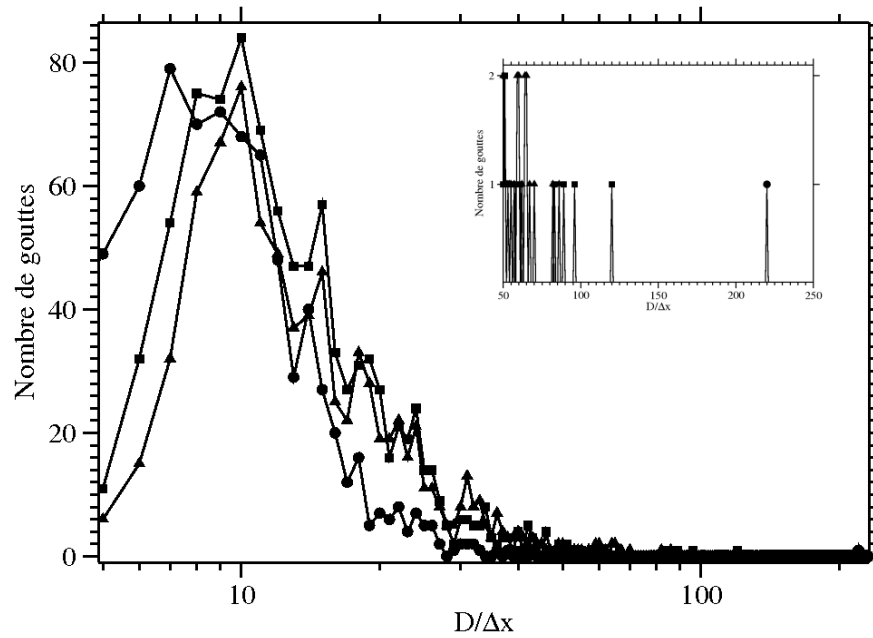


FIGURE 9.4 – PDF du nombre de gouttelettes en fonction de leur diamètre D . Δx est le pas d'espace. $W_e = 19$. \bullet : $t/T_e = 5$; \blacksquare : $t/T_e = 13$; \blacktriangle : $t/T_e = 27$

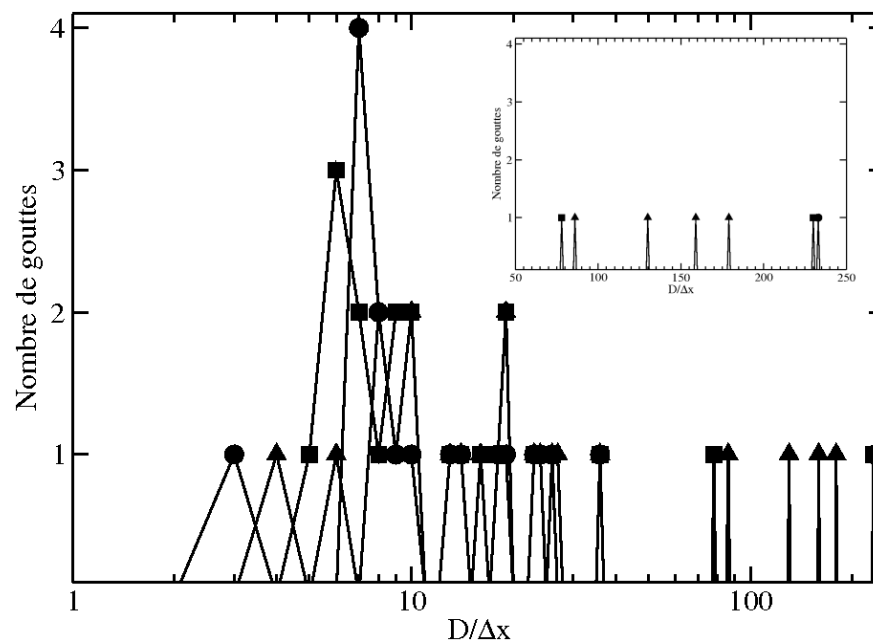


FIGURE 9.5 – PDF du nombre de gouttelettes en fonction de leur diamètre D . Δx est le pas d'espace. $W_e = 2$. \bullet : $t/T_e = 5$; \blacksquare : $t/T_e = 13$; \blacktriangle : $t/T_e = 27$

9.2.3 Bilan d'énergie cinétique

Pour comprendre le rôle joué par les forces de tension de surface dans l'évolution de l'énergie cinétique turbulente, un bilan d'énergie est réalisé pour cette dernière (notée k dans l'équation 9.4). Pour ce faire, une moyenne spatiale conditionnée par la fonction level-set ϕ est introduite. Elle sera notée $\langle \cdot \rangle_\phi$ en référence au paramètre conditionnant ϕ . Soit $\mathcal{D}_{\tilde{\phi}}$:

$$\mathcal{D}_{\tilde{\phi}} = \{\mathbf{x} \in \mathcal{D}, \phi(\mathbf{x}) \in [\tilde{\phi}, \tilde{\phi} + \Delta x]\} \quad (9.2)$$

$\mathcal{D}_{\tilde{\phi}}$ représente les points du domaine numérique \mathcal{D} pour lesquels les valeurs de la level-set ϕ appartiennent à l'intervalle $[\tilde{\phi}, \tilde{\phi} + \Delta x]$. Ces points appartiennent à la couronne de largeur Δx et de rayon $\tilde{\phi}$. La moyenne $\langle \cdot \rangle_\phi$ est définie de la façon suivante. Si f est une fonction scalaire, la moyenne $\langle f \rangle_\phi$ est définie par :

$$\langle f \rangle_\phi = \frac{1}{\text{card}(\mathcal{D}_\phi)} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\phi} f(\mathbf{x}) \quad (9.3)$$

Ainsi, en utilisant la moyenne $\langle \cdot \rangle_\phi$, l'équation-bilan de l'énergie (qui est en fait un bilan de puissance) peut s'écrire [22] :

$$\underbrace{\langle \frac{\partial k}{\partial t} \rangle_\phi}_I + \underbrace{\langle u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} \rangle_\phi}_{III} = \underbrace{\langle \frac{\partial}{\partial x_j} (2\mu u_i s_{ij}) \rangle_\phi}_{II} + \underbrace{\langle -\frac{\partial}{\partial x_j} (p u_j) \rangle_\phi}_{IV} + \underbrace{\langle -2\mu s_{ij} s_{ij} \rangle_\phi}_V + \underbrace{\langle \rho u_i F_i \rangle_\phi}_{VI} \quad (9.4)$$

où le terme I est la variation temporelle de k , le terme II la puissance des forces visqueuses, le terme III le transport de k , le terme IV la puissance des forces de pression, le terme V la dissipation et le terme VI la puissance des forces interfaciales \mathbf{F} . Ici, \mathbf{F} est donnée par : $\mathbf{F} = \sigma \kappa \delta(\phi) \nabla \phi$. Sur la figure 9.6, les différents termes de l'équation (9.4) sont représentés en fonction du temps. A chaque instant, le bilan est réalisé sur l'interface ($\phi = 0$). Par exemple, le terme I sur la figure 9.6 est : $\langle \frac{\partial k}{\partial t} \rangle_{\phi=0}(t)$. Tous les termes sont normalisés par $\epsilon(t)$. Une comparaison est réalisée pour différents W_e . Trois types de comportement sont distingués sur la figure 9.6 : les cas avec déformations interfaciales à petites échelles ($W_e = 110, 63, 19$), les cas avec déformations interfaciales à grandes échelles ($W_e = 0.2, 0.05$) et les cas de transition ($W_e = 2, 1$).

Les cas avec déformations interfaciales à petites échelles désignent $W_e = 110, 63$ et 19 où les interfaces présentent de grandes déformations en présence de petites échelles interfaciales. Le terme prédominant est le terme V (dissipation) mais $\langle \frac{\partial k}{\partial t} \rangle_{\phi=0} \neq - \langle \epsilon \rangle_{\phi=0}$ (ou encore terme I \neq terme V), ce qui montre une perte de l'isotropie sur l'interface. Sur la figure 9.7, le même bilan d'énergie est réalisé pour $W_e = 110$ mais loin de l'interface ($\phi/\Delta x = 5$). Loin de l'interface, la relation $\langle \frac{\partial k}{\partial t} \rangle_\phi = - \langle \epsilon \rangle_\phi$ est vérifiée. Ceci est vérifié pour tous les W_e loin de l'interface. Les termes de transport (III) et de pression (IV) ont un comportement symétrique et se compensent. De retour à la figure 9.6 pour $W_e = 110, 63$ et 19 , les termes III et IV ont des comportements similaires mais l'amplitude du terme IV est plus forte que celle du terme III, ce qui aboutit à $\langle \frac{\partial k}{\partial t} \rangle_{\phi=0} \neq - \langle \epsilon \rangle_{\phi=0}$. Le terme interfacial (VI) est faible. En effet, terme VI $\approx u_i \sigma \kappa |\nabla \phi|$ et comme on peut le voir sur la figure 9.2, κ peut être

9.2 Interaction interface/turbulence : Résultats généraux

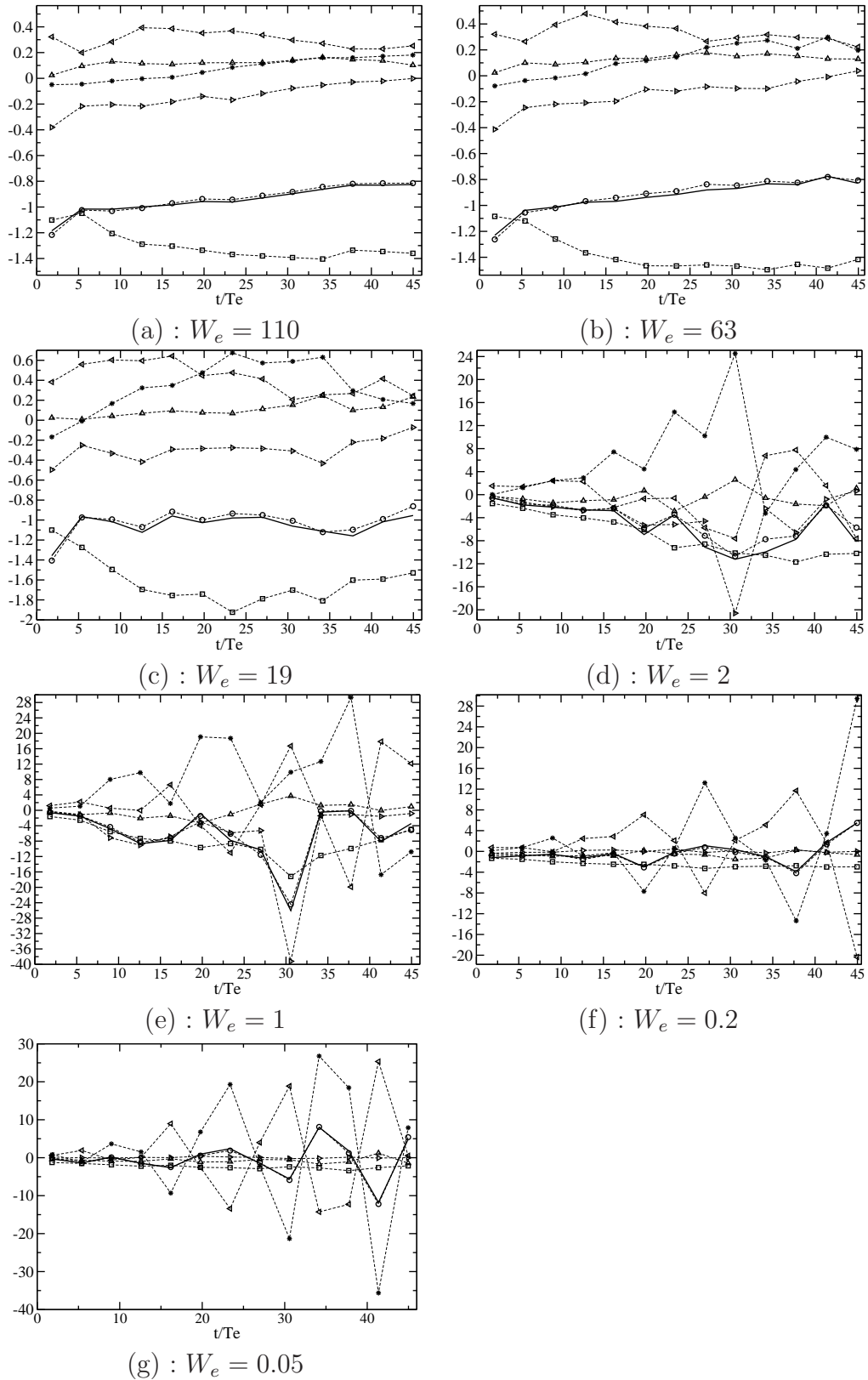


FIGURE 9.6 – \circ , variation temporelle (terme I); \triangle , termes visqueux (terme II); \triangleright , transport (terme III); \triangleleft , termes de pression (terme IV); \square , dissipation (terme V); $*$, termes interfaciaux (terme VI); ligne continue, somme des termes II-VI. Voir Eq. (9.4) pour les différents termes. Chaque terme est normalisé par $\epsilon(t)$.

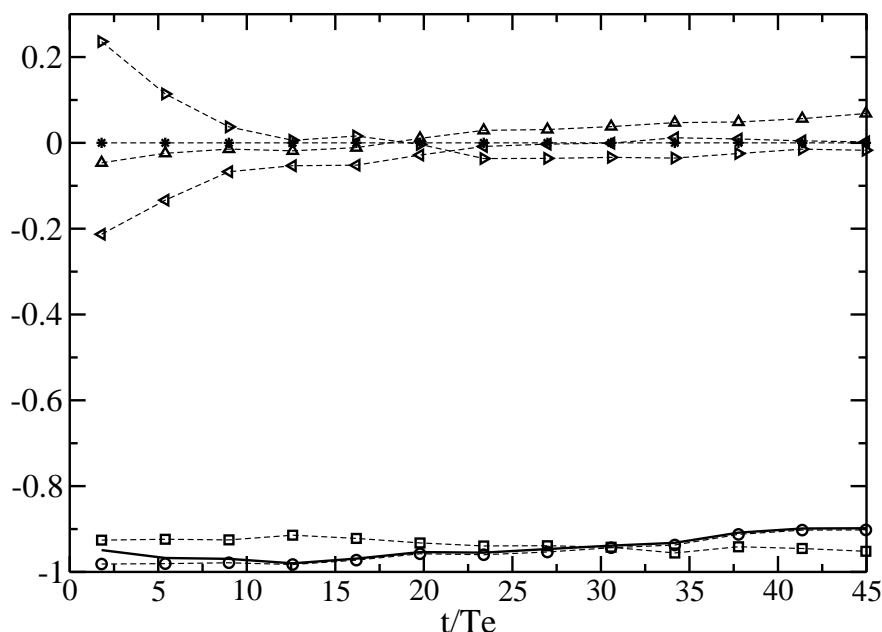


FIGURE 9.7 – Loin de l'interface. $W_e = 110$. \circ , variation temporelle (terme I); \triangle , termes visqueux (terme II); \triangleright , transport (terme III); \triangleleft , termes de pression (terme IV); \square , dissipation (terme V); $*$, termes interfaciaux (terme VI); ligne continue, somme des termes II-VI. Voir Eq. (9.4) pour les différents termes. Chaque terme est normalisé par $\epsilon(t)$.

très grand. Mais $\sigma_{W_e=110,63,19} \ll 1$ et ainsi le produit $\sigma\kappa$ est petit pour $W_e = 110, 63$ et 19 , ce qui explique la faible amplitude du terme (VI). Ainsi, la puissance des forces interfaciales est pilotée plus par le coefficient de tension de surface σ que par la courbure κ . Autrement dit, le terme prédominant dans le produit $\sigma\kappa$ est σ .

Les cas avec déformations interfaciales à grandes échelles désignent $W_e = 0.2$ et 0.05 , où l'interface reste pratiquement plate. La similitude observée précédemment entre les termes de transport (III) et de pression (IV) n'est plus vérifiée pour $W_e = 0.2$ et 0.05 . Pour $t/T_e \geq 15$, les deux termes prédominants sont les termes de pression (IV) et interfacial (VI). Leurs évolutions temporelles sont comparables et oscillent d'après une fréquence de 0.17 Hz pour $W_e = 0.2$ et 0.25 Hz pour $W_e = 0.05$. D'après l'analyse de Lamb [71], la fréquence des ondes de surface est donnée par :

$$f_{lamb} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\sigma\chi^3}{2\rho}} \quad (9.5)$$

où $\chi = 1$ ici. Finalement, $f_{lamb}^{W_e=0.2} = 0.15 \text{ Hz}$ et $f_{lamb}^{W_e=0.05} = 0.28 \text{ Hz}$.

	fréquence mesurée sur la figure 9.6	fréquence calculée par la la formule (9.5)
$W_e = 0.2$	0.17	0.15
$W_e = 0.05$	0.25	0.28

Ainsi les ondes observées pour $W_e = 0.2$ sur la figure 9.2 sont des ondes de surface. Les termes de pression et interfaciaux (IV and V) oscillent avec la même fréquence caractéristique donnée par les ondes de surface à l'interface ($W_e = 0.2$ et 0.05). A propos du produit $\sigma\kappa$, σ est prédominant sur κ . En effet, $\kappa \ll 1$ (interface pratiquement plane) alors que $\sigma \gg 1$ pour $W_e = 0.2$ et 0.05 . Comme on peut le voir sur la figure 9.6, le terme interfacial VI est fort, et

ceci est dû à une valeur élevée de σ .

Les cas de transition sont $W_e = 2$ et $W_e = 1$. Aux temps courts, ($t/T_e \leq 15$), les conclusions sont les mêmes que pour les cas avec déformations interfaciales à petites échelles ($W_e = 110, 63$ and 19). Une réserve toutefois pour $W_e = 1$ où le terme interfacial est fort et le comportement se rapproche alors des cas où les déformations interfaciales sont à grandes échelles ($W_e = 0.2$ et $W_e = 0.05$). Le cas $W_e = 1$ est bien un cas de transition. Pour les temps plus longs ($t/T_e \geq 15$), le terme interfacial (VI) augmente pour $15 \leq t/T_e \leq 30$ pour $W_e = 2$. Si on revient à la figure 9.2, la courbure des plus grosses gouttes n'augmente pas suffisamment pour $t/T_e \geq 15$ pour être responsable de l'augmentation du terme VI. Pour $W_e = 2$, de $t/T_e = 15$ à $t/T_e = 30$, les grosses gouttes oscillent sous l'effet de deux contributions : la turbulence qui impose des déformations à l'interface et les forces de tension de surface qui jouent le rôle d'une force de rappel. Ces oscillations créent des augmentations locales de vitesse à proximité de l'interface, ce qui provoque l'augmentation du terme VI sur l'interface. La viscosité amortit les oscillations. Ainsi la turbulence décroît en temps, les gouttes gardent leur forme sphérique et les vitesses locales au voisinage de l'interface finissent par décroître. Ceci explique la décroissance du terme interfacial VI à partir de $t/T_e = 30$ pour $W_e = 2$. Pour $t/T_e \geq 15$ et pour $W_e = 1$, le comportement est similaire mais moins net. De $t/T_e \geq 15$ à $t/T_e \geq 25$ le terme interfacial VI continue à augmenter sous l'effet des oscillations comme expliqué précédemment. Puis, de $t/T_e = 25$ à $t/T_e = 32$, le terme interfacial redescend à un niveau plus faible sous l'effet de l'amortissement par la viscosité. Mais le terme VI augmente à nouveau à partir de $t/T_e = 32$ pour finalement atteindre un maximum. Nous n'expliquons pas cette augmentation. A noter que la dissipation (terme V) pour $W_e = 2$ et $W_e = 1$ est plus forte que pour les autres W_e .

9.2.4 Evolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente : influence du nombre de Weber

Sur la figure 9.8, l'évolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente normalisée $(k - k_\infty)/k_\infty$ est représentée pour différents nombre de Weber. k_∞ est l'énergie cinétique turbulente du cas de référence $\sigma = 0$. Pour les temps courts ($t/T_e < 6$) et pour tous les nombres de Weber, $(k - k_\infty)/k_\infty < 0$, et ainsi l'énergie cinétique turbulente décroît plus vite quand $W_e < \infty$. Cette décroissance est d'autant plus forte que σ est grand. Les cas $W_e < \infty$ se différent du cas $W_e = \infty$ uniquement au travers de la présence de tension de surface. Ainsi, il y a un transfert d'énergie cinétique de la turbulence du fluide vers l'interface. L'énergie est utilisée pour casser l'interface en parties plus petites. Pour $W_e = 0.2$, où σ est suffisamment grand pour que l'interface ne se casse pas, l'énergie cinétique turbulente est utilisée pour déformer l'interface sous forme d'ondes de surface.

Pour les temps plus longs, $(k - k_\infty)/k_\infty$ augmente pour tous les nombres de Weber. Trois comportements peuvent être isolés : les cas où les déformations interfaciales se font à petites échelles ($W_e = 110, 63$ et 19), les cas où les déformations interfaciales se font à grandes échelles ($W_e = 0.2$ et $W_e = 0.05$) et les cas de transition ($W_e = 2$ et $W_e = 1$).

Pour les cas où les déformations interfaciales se font à petites échelles ($W_e = 110, 63, 19$) $(k - k_\infty)/k_\infty$ augmente mais reste négatif. L'interface est divisée, constituée de filaments et de petites gouttelettes (Fig. 9.2). L'énergie interfaciale est utilisée pour la coalescence et la création de structures interfaciales plus grandes. Même aux temps longs, $(k - k_\infty)/k_\infty$ reste négatif, ce qui témoigne d'une diminution de l'énergie cinétique turbulente k , comparé au

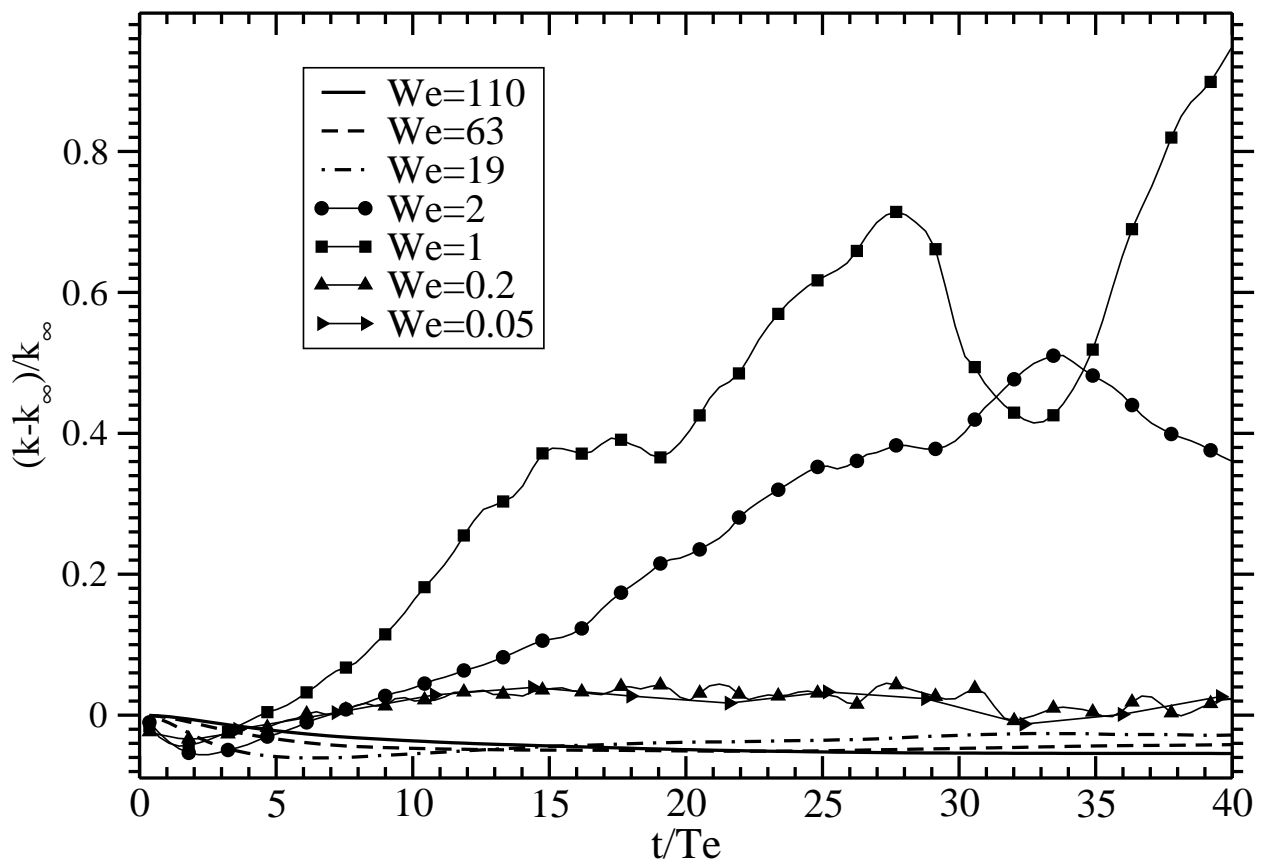


FIGURE 9.8 – Evolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente pour différents We_e .

cas monophasique ($W_e = \infty$). Pour les grands W_e , aux grands temps, la coalescence et le phénomène de rupture de la nappe sont importants (voir Fig. 9.2), ce qui explique la perte d'énergie cinétique turbulente dans les interactions diphasiques.

Pour les cas de transition ($W_e = 2$ et $W_e = 1$), $k - k_\infty$ devient positif pour $\frac{t}{T_e} \geq 7$ pour $W_e = 2$ et pour $\frac{t}{T_e} \geq 4$ pour $W_e = 1$. A la différences des cas précédents, de grosses gouttes non sphériques sont observées. Sous l'effet des forces de tension de surface, ces gouttes oscillent sans coalescer durant toute la simulation. En effet, la distance entre les gouttes pour $W_e = 2$ est bien largement supérieure à la distance moyenne entre deux gouttes pour $W_e = 19$. Ces oscillations expliquent l'augmentation de $(k - k_\infty)/k_\infty$ quand k_∞ diminue jusqu'à $t/T_e = 30$ pour $W_e = 2$ et $t/T_e = 25$ pour $W_e = 1$. Pour $t/T_e \geq 30$ et $W_e = 2$, et pour $t/T_e \geq 25$ et $W_e = 1$, $(k - k_\infty)/k_\infty$ décroît. Cela peut s'expliquer en revenant sur la figure 9.6 où on a montré que les grosses gouttes cessent d'osciller à partir de $t/T_e = 30$ pour $W_e = 2$, et à partir de $t/T_e = 25$ pour $W_e = 1$. Encore une fois, comme pour la figure 9.6, l'augmentation aux très grands temps de $(k - k_\infty)/k_\infty$ pour $W_e = 1$ ne s'explique pas.

Pour les cas où les déformations interfaciales se font à de grandes échelles ($W_e = 0.2$ et $W_e = 0.05$), $k - k_\infty$ devient positif ($\frac{t}{T_e} \geq 6$). Du fait des forts coefficients de tension de surface, l'interface ne se brise pas et est seulement perturbée par les ondes de surface. Ces dernières sont un gain pour l'énergie cinétique turbulente, mais sont amorties par la viscosité. Ainsi, aux grands temps, $k - k_\infty$ décroît. Mais comme k_∞ décroît également, le rapport $(k - k_\infty)/k_\infty$ affiche un palier pour $W_e = 0.2$ et $W_e = 0.05$ aux grands temps.

Nous venons de mettre en évidence un transfert d'énergie entre l'interface et la turbulence du fluide. Les forces de tension de surface sont la clef de voûte de ce transfert. Dans le paragraphe suivant, nous nous intéressons aux répercussions de la présence d'une interface sur la turbulence. Pour ce faire, des statistiques sont menées sur les fluctuations turbulentes. Des études similaires ont été menées dans le cas du comportement de la turbulence en proche paroi ou à proximité d'une surface libre [105, 165]. Nous allons montrer que l'interface introduit une redistribution entre les composantes de l'énergie cinétique turbulente.

9.3 Statistiques sur la turbulence. Réorganisation intercomposantes de l'énergie cinétique turbulente

De nombreux travaux ont été menés pour comprendre l'interaction entre la turbulence et une surface libre. Bien que notre interface ne soit pas une surface libre, ces travaux nous servent de point de départ quant à la compréhension de cette interaction entre la turbulence et une condition limite. La surface libre indéformable est assimilée à une surface de blocage qui impose une bidimensionalité à la turbulence. L'énergie de la composante normale est redistribuée sur les composantes tangentielles. La redistribution de l'énergie selon les composantes normale et tangentielle est basée sur l'existence de *splats* et *anti-splats*. Le *splat* est le phénomène physique qui caractérise l'arrivée de fluide contre la surface libre et qui est redistribuée selon les composantes tangentielles. L'*anti-splat* naît de la rencontre de deux *splats* et caractérise la sortie de fluide qui longeait au préalable l'interface. D'après Perot et Moin [105], le transfert d'énergie entre les composantes normale et tangentielle est dû à un déséquilibre entre les *splats* et les *anti-splats*. Et c'est la viscosité qui piloterait ce déséquilibre. D'après Perot et Moin [105], la viscosité amortit l'énergie près de la discontinuité, et les antisplats ne sont plus alimentés. Ce déséquilibre induit un transfert d'énergie.

Les conclusions de Perot et Moin [105] ont été établies à des temps très courts ($t/T_e \ll 1$) et pour de grands nombres de Reynolds turbulents. A des temps si courts, la turbulence n'a pas le temps d'interagir avec elle-même, et les travaux de Perot et Moin [105] s'inscrivent dans le cadre de la RDT (Rapid Distorsion Theory) de la turbulence. D'après d'autres travaux, notamment ceux de Walker [165], le déséquilibre entre *splats* et *anti-splats* n'est pas uniquement dû à la viscosité. Le rôle de la viscosité n'est même pas aussi bien identifié que dans les travaux de Perot et Moin [105]. Il résulterait de deux mécanismes : le premier lié au blocage de l'interface. Le deuxième est dû à un retour à l'isotropie : l'écoulement tente de réduire l'anisotropie due au blocage de l'interface pour retrouver l'isotropie loin de celle-ci. Ces deux mécanismes sont d'autant plus forts aux temps longs lorsque l'anisotropie est bien développée. Les conclusions de Walker [165] restent cohérentes avec la théorie RDT étendue aux temps longs par Magnaudet [89]. Ainsi, le transfert énergétique inter-composantes proche de la surface libre n'est pas uniquement dû à la présence de l'interface, mais aussi à la turbulence elle-même via son niveau d'isotropie.

Fort de ces conclusions, nous allons mener des études similaires dans le cas de l'interaction de la turbulence avec l'interface. Dans notre cas, l'interface ne reste pas plane. De grandes déformations sont même observées. De plus, la position de l'interface varie au cours du temps. Dans le cas d'une surface libre plane, les directions parallèles à la discontinuité sont homogènes. Ceci n'est plus vrai dans la cas d'une interface déformable. Les moyennes seront alors effectuées dans des iso-surfaces où la turbulence est supposée homogène à une même distance de l'interface.

Si \mathbf{n} et $\boldsymbol{\tau}$ sont respectivement les vecteurs unités locaux normal et tangentiel, alors les contraintes de Reynolds normales u'_n et tangentielles u'_τ sont définies par :

$$\begin{aligned} u'_n &= \mathbf{u}' \cdot \mathbf{n} \\ u'_\tau &= \mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\tau} \end{aligned} \quad (9.6)$$

Les figures 9.9 et 9.10 représentent respectivement $\langle u_n'^2 \rangle_\phi \left(\frac{\phi}{\delta}\right)$ et $\langle u_\tau'^2 \rangle_\phi \left(\frac{\phi}{\delta}\right)$.

L'utilisation de ϕ permet de représenter les tensions de Reynolds en fonction de la distance à l'interface. $\langle u_n'^2 \rangle_\phi \left(\frac{\phi}{\delta}\right)$ et $\langle u_\tau'^2 \rangle_\phi \left(\frac{\phi}{\delta}\right)$ sont normalisées par leurs valeurs respectives loin de l'interface $\phi/\delta \gg 1$. Pour les figures 9.9 et 9.10, des oscillations apparaissent loin de l'interface ($\phi/\delta \geq 1.5$), ce qui indique que les moyennes ne sont pas tout à fait convergées. Une façon d'améliorer cette résolution est l'utilisation de moyennes d'ensemble en plus de la moyenne spatiale. Pour ce faire, les simulations doivent être menées plusieurs fois sous les mêmes paramètres d'écoulement mais avec une condition initiale différente (statistiquement parlant). Nous avons réalisé de telles moyennes d'ensemble avec des simulations où le maillage était de 128^3 et nous y reviendrons plus tard. Il est apparu que les statistiques sont bien améliorées loin de l'interface. Cependant, les statistiques proches de l'interface sont faiblement améliorées par l'utilisation de moyennes d'ensemble supplémentaires. Les courbes présentées sur les figures 9.9 et 9.10 sont réalisées avec des maillages 512^3 où aucune moyenne d'ensemble n'est utilisée. La principale raison pour cela est l'impossibilité de lancer des centaines de fois le même calcul pour avoir une moyenne d'ensemble convergée à cause de temps CPU beaucoup trop élevés.

L'analyse des figures 9.9 et 9.10 se fait en deux étapes. La première aux temps courts $t/T_e \leq 2$. Et ensuite viendra l'analyse aux temps plus longs $t/T_e > 2$.

9.3 Statistiques sur la turbulence. Réorganisation intercomposantes de l'énergie cinétique turbulente

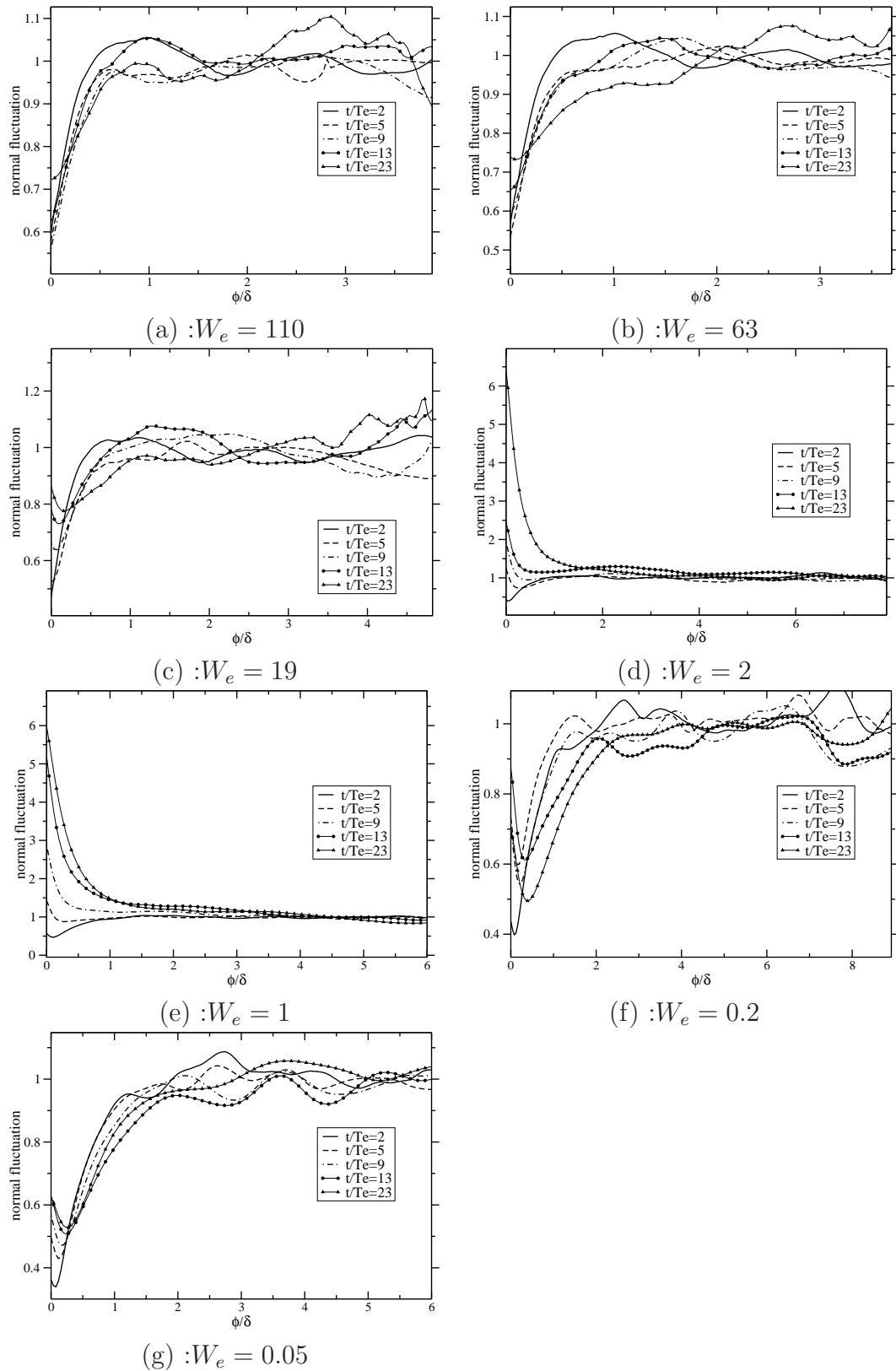


FIGURE 9.9 – Tensions de Reynolds normales en fonction de ϕ (distance à l'interface) pour différents W_e à différents $\frac{t}{T_e}$

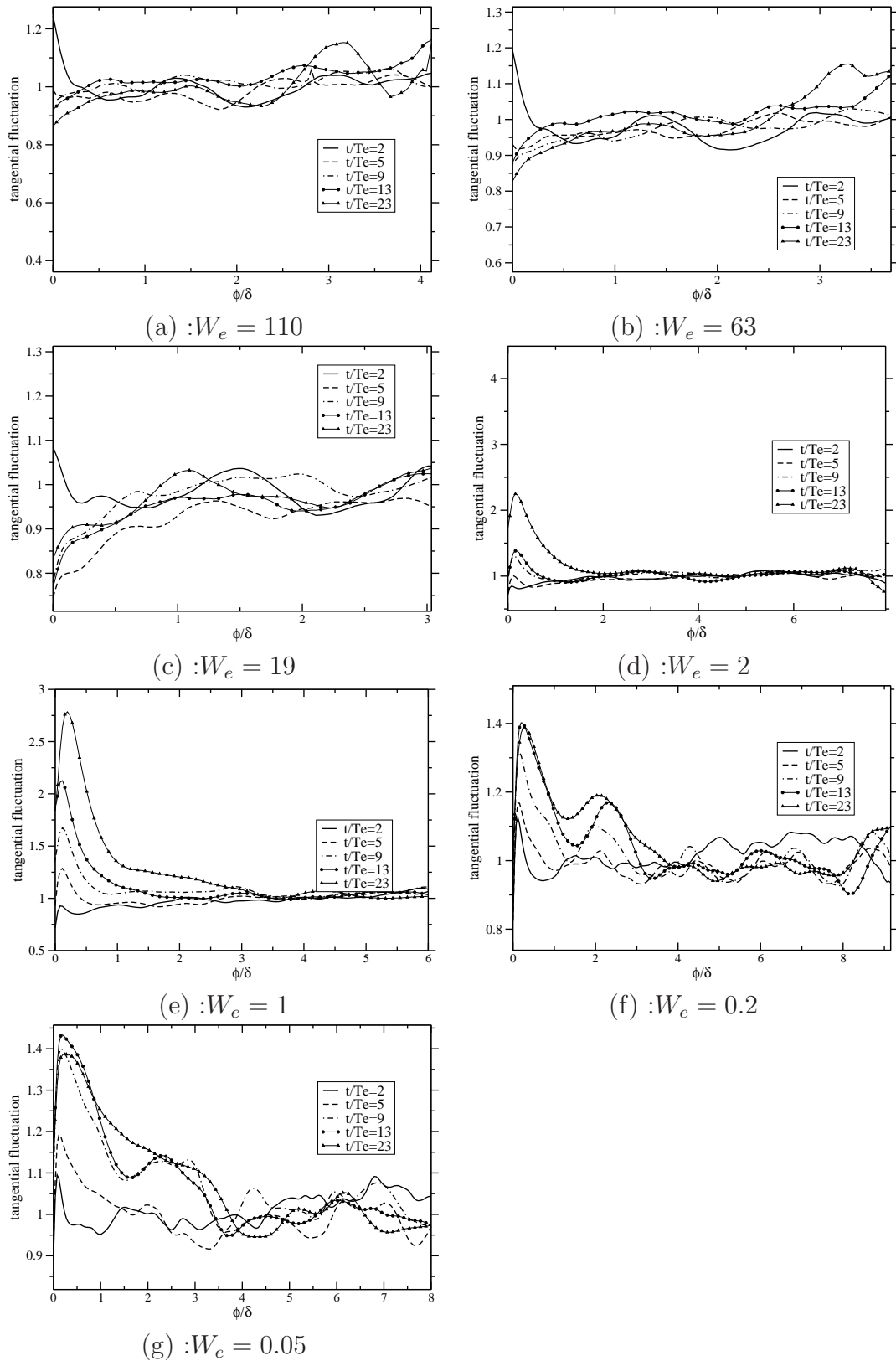


FIGURE 9.10 – Tensions de Reynolds tangentielles en fonction de ϕ (distance à l'interface) pour différents W_e à différents $\frac{t}{T_e}$

9.3.1 Analyse aux temps courts des tensions de Reynolds $t/T_e \leq 2$

Les figures 9.9 et 9.10 montrent deux tendances principales. Aux temps courts ($t/T_e \leq 2$), pour $0 \leq x/\delta \leq 1$, une perte pour $\langle u_n'^2 \rangle_\phi \left(\frac{\phi}{\delta}\right)$ et un gain pour $\langle u_\tau'^2 \rangle_\phi \left(\frac{\phi}{\delta}\right)$ sont visibles proche de l'interface. Tous les nombres de Weber sont touchés par cette tendance. Ainsi près de l'interface, un transfert d'énergie s'opère de $\langle u_n'^2 \rangle_\phi \left(\frac{\phi}{\delta}\right)$ vers $\langle u_\tau'^2 \rangle_\phi \left(\frac{\phi}{\delta}\right)$. Afin de comprendre le transfert énergétique entre les composantes de l'énergie cinétique turbulente, les termes de l'équation de transport pour les contraintes de Reynolds vont être présentées. Ces bilans ne peuvent être conduit que pour des temps courts. Les raisons sont les suivantes :

- En plus de la moyenne volumique, une moyenne d'ensemble doit être utilisée pour les équations sur les contraintes de Reynolds sans quoi les courbes sont trop bruitées. Ceci nous oblige à lancer plusieurs fois la même simulation (ici, on a choisi 100 fois). Ainsi, pour des raisons de temps de calcul, seuls les petits temps seront considérés. De même, uniquement dans cette partie, des simulations 128^3 seront considérées.
- Dans le cas de surfaces libres ou de parois, les moyennes sont calculées dans des plans parallèles à la condition limite. L'hypothèse d'homogénéité dans chaque plan est appliquée, ce qui augmente la convergence des moyennes. Seule la distance à la discontinuité est prise en compte. Dans notre cas, ceci revient à une interface peu déformée, c'est-à-dire à considérer une interface avec une forte tension de surface et aux temps courts.
- Les calculs et l'interprétation des différents termes de l'équation de transport des tensions de Reynolds est beaucoup plus clair lorsque la normale à la discontinuité est constante en espace. Ceci revient pour nous à une interface pratiquement plane

Pour toutes les raisons énoncées précédemment, l'étude dans cette partie est réalisée à $W_e = 0.2$. Les bilans sont effectués juste après l'introduction de la nappe (moins d'un demi temps de retournement). Dans cette section, x et y sont les coordonnées parallèles (tangentielles) à l'interface, et les vitesses respectives seront notées u et v . Sous l'hypothèse d'une interface suffisamment plane, les statistiques de la turbulence sont invariantes par rotation dans des plans parallèles à l'interface. Ainsi, les directions x et y sont indiscernables et la composante x désignera la composante tangentielle. La normale à la surface fixe la direction z et $z = 0$ correspond à la position sur l'interface. La vitesse correspondante est notée w . Les équations de transport des tensions de Reynolds s'obtiennent à partir des équations de Navier-Stokes moyennées (Hinze [53]). Les statistiques sont obtenues en moyennant selon les directions x et y homogènes. La moyenne d'ensemble est utilisée également. Pour un écoulement à moyenne nulle, l'équation de transport des tensions de Reynolds s'écrit :

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \langle u_i u_j \rangle}_{VI} = \underbrace{\frac{1}{\rho} \langle p \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \rangle}_I - \underbrace{\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \langle p u_j \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle p u_i \rangle \right)}_{II} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \langle u_i u_j u_k \rangle}_{III} + \underbrace{\nu \frac{\partial^2 \langle u_i u_j \rangle}{\partial x_k \partial x_k}}_{IV} - \underbrace{2\nu \langle \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \rangle}_{V} \quad (9.7)$$

La description des principaux termes est la suivante :

- Terme I : corrélation pression-déformation. Représente la redistribution inter-composantes de l'énergie cinétique due aux interactions entre le champ de pression fluctuant et le

champ de déformations.

- Terme II : transport de $\langle u_i u_j \rangle$ par les fluctuations de pression
- Terme III : transport de $\langle u_i u_j \rangle$ par la vitesse turbulente
- Terme IV : diffusion visqueuse
- Terme V : dissipation visqueuse
- Terme VI : terme temporel

Bilan pour la contrainte de Reynolds normale $\langle w^2 \rangle$

Les termes de l'équation intervenant dans le bilan pour la contrainte normale $\langle w^2 \rangle$ sont représentés sur la figure 9.11. De $z/\delta = 0$ à 0.2, le terme de pression-déformation

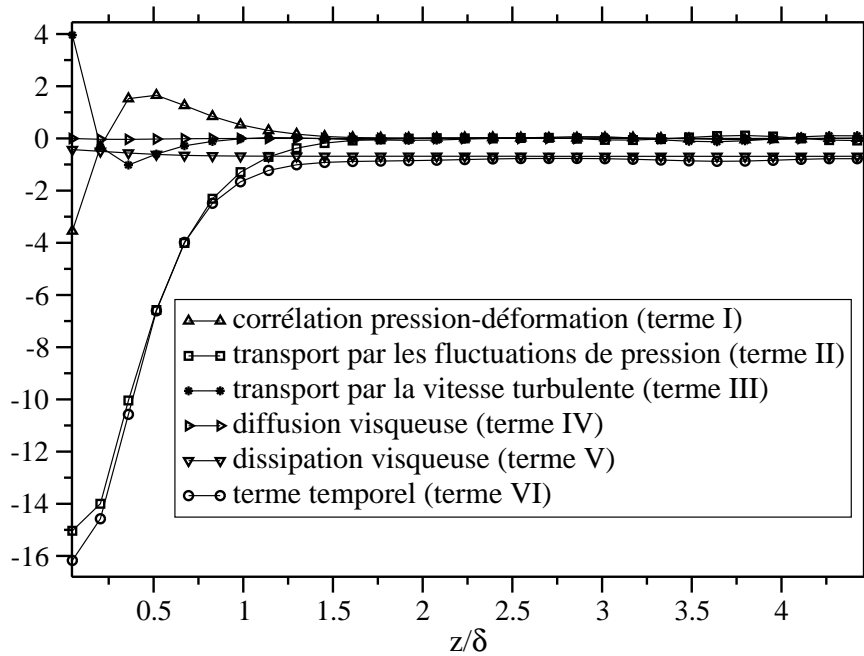


FIGURE 9.11 – Termes de l'équation (9.7), l'équation de transport pour $\langle w^2 \rangle$ (tensions de Reynolds normales), normalisés par ϵ .

(terme I) représente une perte pour le bilan de contrainte normale. Ceci corrobore la perte observée pour la contrainte de Reynolds normale proche de l'interface. Cette perte correspond à un transfert d'énergie vers la composante tangentielle $\langle u^2 \rangle$. Ce transfert est dû à un blocage par l'interface qui impose un comportement bidimensionnel à la turbulence. Plus loin de l'interface, pour $z/\delta \geq 0.2$, le terme de pression-déformation (terme I) est un gain, et un transfert d'énergie de $\langle u^2 \rangle$ vers $\langle w^2 \rangle$ s'opère loin de l'interface indiquant une anisotropie des contraintes de Reynolds. Pour comprendre le rôle joué par le terme de pression-déformation sur l'isotropie, le tenseur d'anisotropie est étudié. Ce tenseur a_{ij} décrit la distribution d'énergie entre les composantes de la vitesse fluctuantes.

$$a_{ij} = \frac{\langle u_i u_j \rangle - \frac{\langle u_m u_m \rangle}{3} \delta_{ij}}{u_m u_m} \tag{9.8}$$

où δ_{ij} est la fonction delta de Kronecker. Pour une turbulence isotrope, $a_{ii} = 0$. a_{uu} et a_{ww} sont représentées sur la figure 9.12. Loin de l'interface le tenseur d'anisotropie est nul alors

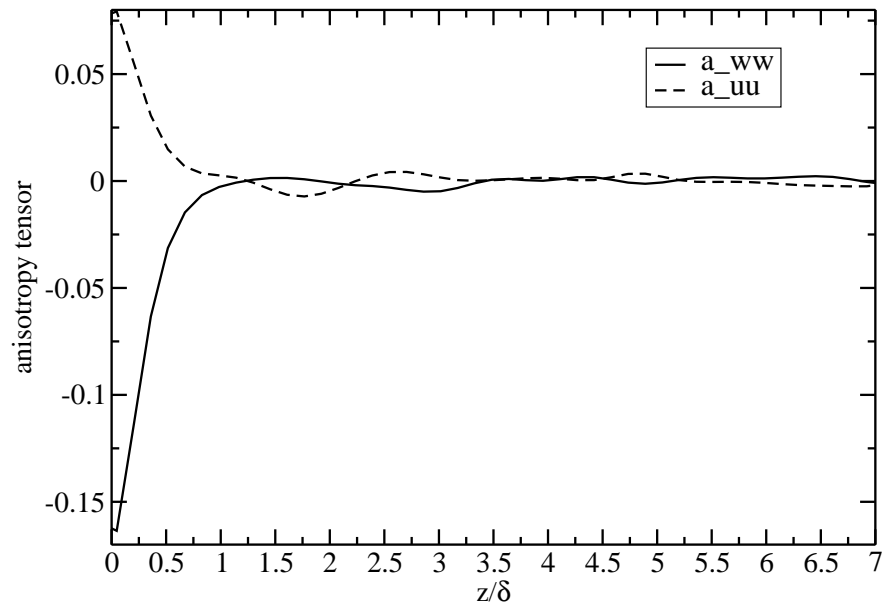


FIGURE 9.12 – Tenseur d'anisotropie a_{uu} et a_{ww} .

que l'anisotropie augmente lorsque l'on se rapproche de l'interface ($z/\delta \leq 1.25$). Le comportement du tenseur d'anisotropie est directement relié au terme de pression-déformation (terme I). Sur la figure 9.11, le terme de pression-déformation est nul pour ($z/\delta \leq 1.25$), ce qui correspond à un retour à l'isotropie de l'écoulement. Ainsi, suffisamment loin de l'interface, le terme de pression-déformation agit pour restorer isotropie perdue au voisinage de l'interface. L'anisotropie au voisinage de l'interface est due à un transfert d'énergie de la composante normale vers la composante tangentielle (blocage de l'interface). Ainsi, il existe un transfert en $\langle u^2 \rangle$ et $\langle w^2 \rangle$ qui résulte de deux mécanismes. Pour $z/\delta \leq 0.2$, le transfert d'énergie de $\langle u^2 \rangle$ vers $\langle w^2 \rangle$ provoque une perte pour le terme I (figure 9.11) : c'est le premier mécanisme. Ce déséquilibre entre $\langle u^2 \rangle$ et $\langle w^2 \rangle$ provoque une anisotropie et provoque un gain pour le terme I plus loin de l'interface ($0.2 \leq z/\delta \leq 1.25$) en faveur d'un retour à l'isotropie : c'est le second mécanisme de transfert d'énergie de $\langle u^2 \rangle$ vers $\langle w^2 \rangle$. A partir de $z/\delta = 1.25$, le terme de pression-déformation est nul, ce qui correspond bien au retour d'une turbulence isotrope $a_{uu} = a_{vv} = 0$. A l'interface $z = 0$, le terme I est équilibré par le transport turbulent (terme III). Proche de l'interface ($z/\delta \leq 0.2$), le transport turbulent est un gain. Il y a donc une diffusion turbulente de la composante normale $\langle w^2 \rangle$ près de l'interface, pour compenser la diminution de w^2 due au blocage au voisinage de l'interface. La diffusion visqueuse (terme IV) n'est pas significative. La dissipation visqueuse (terme V) est presque constante et observe un léger amortissement au voisinage de l'interface. Pour satisfaire la forte décroissance du terme temporel près de l'interface, le terme prédominant est le transport dû aux fluctuations de pression (terme II).

Bilan pour la contrainte de Reynolds tangentielle $\langle u^2 \rangle$

Les termes de l'équation intervenant dans le bilan pour la contrainte tangentielle $\langle u^2 \rangle$ sont représentés sur la figure 9.13. Pour $0 \leq z/\delta \leq 0.2$, le terme de pression-déformation est un gain pour le bilan des contraintes tangentielles. Comme prévu, ce gain est la moitié

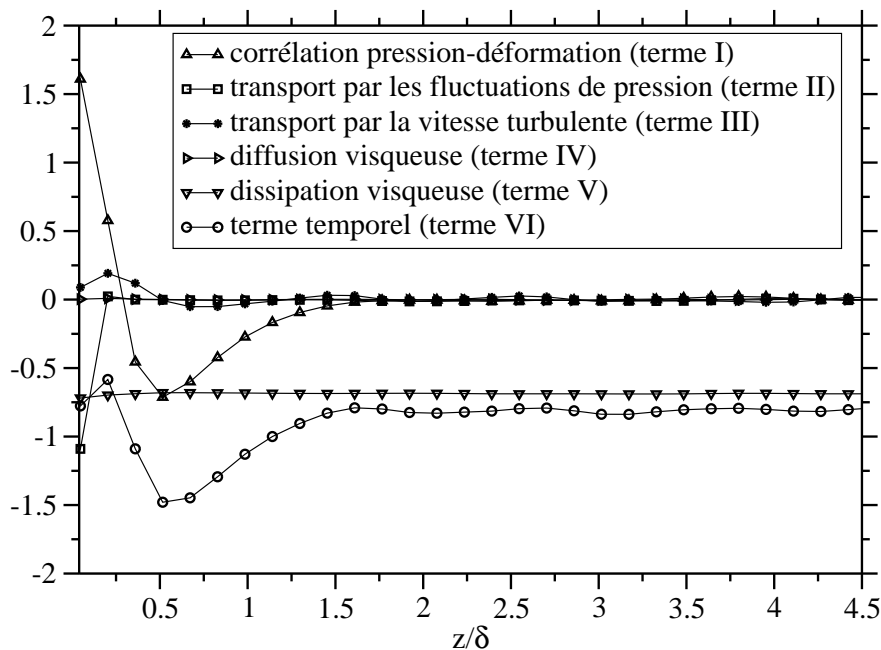


FIGURE 9.13 – Termes de l'équation (9.7), l'équation de transport pour $\langle u^2 \rangle$ (tensions de Reynolds tangentielles), normalisés par ϵ .

(en valeur absolue) de la perte observée pour le bilan de contraintes normales. Son signe est opposé aussi. Les conclusions pour le terme I sont similaires à celles données pour le bilan effectué pour $\langle w^2 \rangle$. On peut remarquer que le terme dû aux fluctuations de pression (terme II) n'est pas nul, et ce malgré l'hypothèse d'homogénéité dans des plans parallèles à l'interface. La raison vient du fait que l'interface n'est pas parfaitement plane et que proche de l'interface, les plans parallèles coupent cette interface, ce qui induit de forts gradients de pression dans un même plan proche de l'interface. En résumé, le saut de pression est inclus dans le calcul du terme II alors qu'il ne le devrait pas. Pour échapper à cette contrainte, il aurait fallu faire les bilans sur chaque isosurface plutôt que sur des plans parallèles.

On vient de mettre en évidence une anisotropie au voisinage de l'interface pour les temps courts. Cette anisotropie est localisée au voisinage de l'interface, et le retour à l'isotropie est réalisé grâce au terme de pression-déformation.

9.3.2 Analyse aux temps longs des tensions de Reynolds $t/T_e \geq 5$

Nous revenons maintenant aux figures 9.9 et 9.10. Pour les temps longs $t/T_e \geq 5$, à l'exception des weber 2, 1, 0.2 et 0.05, $\langle u_n^2 \rangle_\phi$ et $\langle u_\tau^2 \rangle_\phi$ diminuent proche de l'interface. Le transfert d'énergie de $\langle u_n^2 \rangle_\phi$ vers $\langle u_\tau^2 \rangle_\phi$ dû au blocage de l'interface est moins clair.

$W_e = 2$ et $W_e = 1$ apparaissent comme des cas de transition. De grosses gouttes oscillent sous l'effet de la tension de surface sans coalescer. Dans ce cas, pour les grands temps ($t/T_e \geq 5$), l'interface se comporte comme un générateur pour la turbulence, ce qui impose une augmentation locale à la fois pour $\langle u_n^2 \rangle_\phi$ et $\langle u_\tau^2 \rangle_\phi$ près de l'interface (Fig. 9.9 et 9.10).

Pour $W_e = 0.2$ et $W_e = 0.05$, aux grands temps ($t/T_e \geq 5$), $\langle u_n^2 \rangle_\phi$ décroît près de

l'interface ($\phi/\delta \leq 2$) alors que la composante tangentielle $\langle u_\tau'^2 \rangle_\phi$ augmente. Un rapide coup d'œil à la figure 9.2 montre que pour $W_e = 0.2$, l'interface n'est pas déchirée et est seulement perturbée par les ondes de surface. La configuration topologique est proche de celle d'une surface libre plane. Perot et Moin [105] concluent à une augmentation de $\langle u_\tau'^2 \rangle_\phi$ et une diminution de $\langle u_n'^2 \rangle_\phi$ à proximité de la surface libre. Ainsi, une analogie peut être faite entre les cas $W_e = 0.2$ $W_e = 0.05$ aux temps longs et le cas de Perot pour une surface libre. Encore une fois, l'analogie doit être faite avec prudence car les travaux de Perot et Moin [105] concernent des temps très petits (bien inférieurs à ceux caractéristiques de la turbulence).

Sur la figure 9.14, la vorticité Ω_ϕ est représentée comme une fonction de ϕ , la distance signée. La fonction Ω_ϕ doit être comprise de la façon suivante :

$$\Omega_\phi(\phi) = \sqrt{\langle \|\Omega\|^2 \rangle_\phi} \quad (9.9)$$

où $\Omega = \nabla \wedge \mathbf{u}$. Ω_ϕ est normalisée par sa valeur loin de l'interface. Dans tous les cas, de la vorticité est générée proche de l'interface ($\phi/\delta \leq 1$). La vorticité est rapidement générée et reste relativement localisée proche de l'interface. Elle s'étend sur une zone de largeur δ autour de l'interface, même aux temps longs. L'intensité de la vorticité augmente avec le temps et est maximale pour les cas de transition $W_e = 1$ et $W_e = 2$. Ce pic de vorticité témoigne d'une interaction interface/turbulence.

Dans toute cette partie, on a montré que l'interaction interface/turbulence induit de l'anisotropie à proximité de l'interface. Cette anisotropie a un comportement similaire pour tous les nombres de Weber aux temps courts lorsqu'il se produit un transfert d'énergie de la turbulence vers l'interface : les contraintes normales de Reynolds diminuent alors que les contraintes tangentielles augmentent. Pour les temps longs, l'énergie potentielle surfacique contenue dans l'interface est rendue à la turbulence, ce qui complique les conclusions quant au comportement des tensions de Reynolds normales et tangentielles. Cette anisotropie locale devra être prise en compte pour le développement de modèles de sous-maille qui proviennent de l'interaction interface/turbulence. Pour ces modèles, l'hypothèse d'isotropie locale ne tient plus au voisinage de l'interface.

9.4 Spectres d'énergie 3D

Dans cette partie, une analyse spectrale est menée pour identifier les échelles où le couplage interface/turbulence apparaît. Les spectres d'énergie 3D sont tracés et les résultats sont résumés sur la figure 9.15. Une comparaison est effectuée entre sept nombres de Weber et le cas de référence $W_e = \infty$. Ces comparaisons sont effectuées à différents instants (de $t/T_e = 3$ à 30). En abscisse, l'échelle de Kolmogorov choisie pour adimensionner les nombres d'onde est celle à $t/T_e = 3$.

Aux temps courts (pour $t/T_e < 3$), les comportements spectraux sont pratiquement les mêmes entre les situations où $\sigma \neq 0$ et le cas de référence monophasique. Aux temps courts, la tension de surface n'altère pas la répartition spectrale de l'énergie. Aux temps plus longs, des différences plus marquées apparaissent. Pour $W_e < \infty$, l'énergie contenue dans les petites échelles turbulentes (grands nombres d'onde $k\eta_k > 0.2$) est plus importante que dans le cas monophasique $W_e = \infty$. L'interface agit alors comme un générateur aux petites échelles pour la turbulence. Ce gain est limité aux plus grands nombres d'onde et

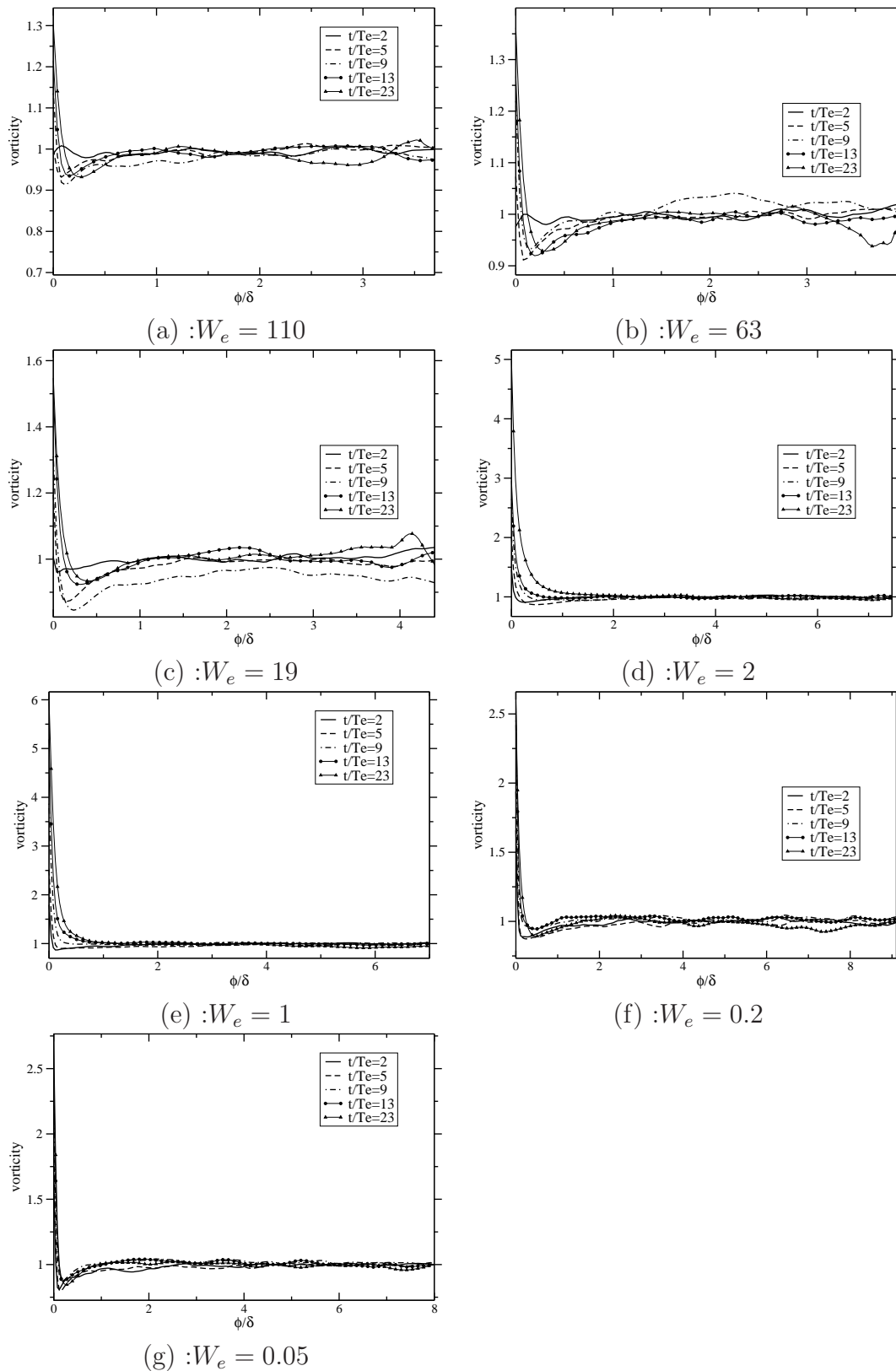


FIGURE 9.14 – Vorticité en fonction de ϕ pour différents W_e à différents $\frac{t}{T_e}$

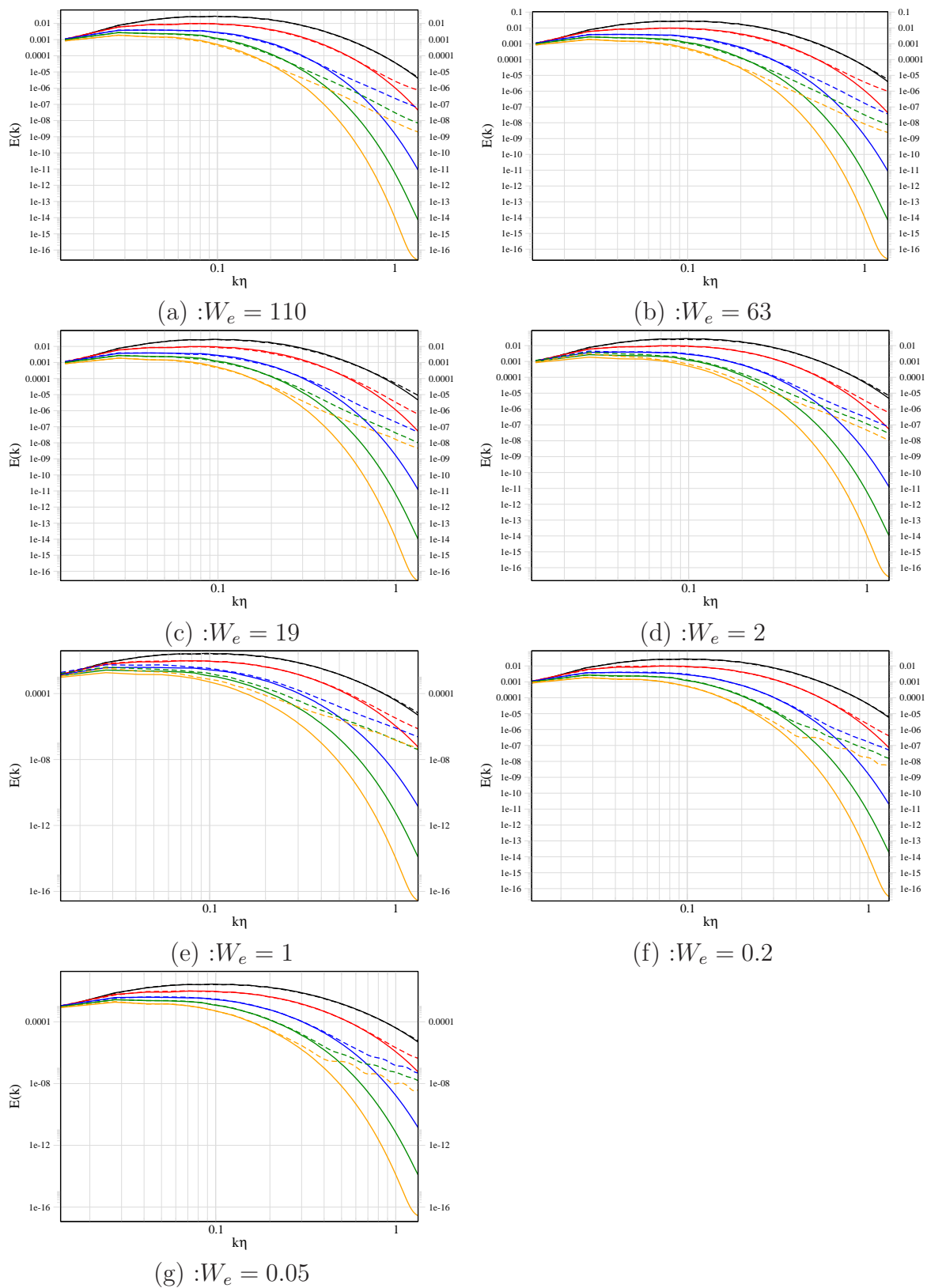


FIGURE 9.15 – Spectres d'énergie 3D. Ligne continue : $W_e = \infty$. Tirets : $W_e < \infty$. Noir : $\frac{t}{T_e} = 3$. Rouge : $\frac{t}{T_e} = 6$. Bleu : $\frac{t}{T_e} = 13$. Vert : $\frac{t}{T_e} = 20$. Orange : $\frac{t}{T_e} = 30$. 512^3 . η est l'échelle spatiale de Kolmogorov à $t/T_e = 3$.

est le résultat d'un transfert d'énergie. Afin de quantifier cette redistribution de l'énergie, un bilan d'énergie cinétique est mené. Pour fixer les notations, examinons le schéma 9.16. Il

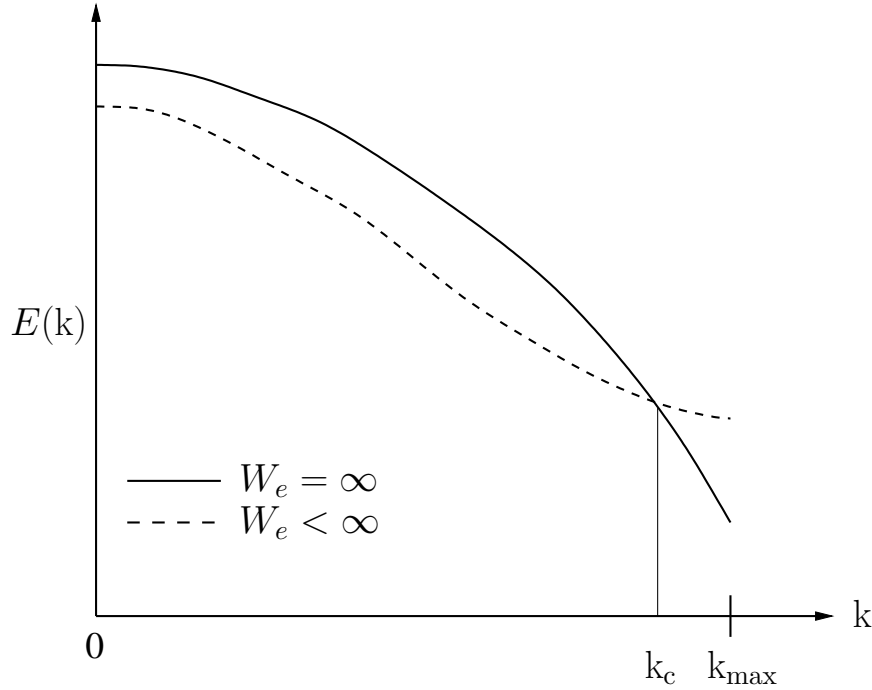


FIGURE 9.16 – Schéma de synthèse reprenant la configuration observée sur la figure 9.15.

synthétise les configurations observées sur la figure 9.15. Sur le schéma 9.16, deux spectres sont représentés. Le premier correspond au cas de référence ($W_e = \infty$), alors que le second représente la configuration pour $W_e < \infty$. k_{\max} est le nombre d'onde maximum simulé. $k_c(W_e)$ est le nombre d'onde auquel les deux spectres se coupent. Le nombre d'onde k_c dépend du nombre de Weber W_e . L'énergie contenue dans les grandes échelles de la turbulence est donnée par $I_1 = \int_0^{k_c} E(k) dk$. L'énergie contenue dans les petites échelles est donnée par

$$I_2 = \int_{k_c}^{k_{\max}} E(k) dk. \text{ L'énergie cinétique turbulente totale est donnée par } I_3 = \int_0^{k_{\max}} E(k) dk.$$

Les résultats sont proposés dans la table 9.1. Dans cette table, ϵ signifie que l'amplitude mesurée est trop faible pour être significative. Le symbole \emptyset signifie qu'il n'est pas possible de déterminer une valeur unique pour k_c et ainsi d'effectuer un bilan d'énergie précis entre les petites et les grandes échelles. Sur la table 9.1, certains W_e n'y figurent pas car la détermination d'un nombre d'onde k_c de façon précise n'a pas été possible. A tous les instants et pour tous les $W_e < \infty$, l'énergie I_1 est plus faible que pour $W_e = \infty$ (cas monophasique). Ainsi, l'interface amortit l'énergie cinétique turbulente aux grandes échelles (petits nombres d'onde). L'amortissement est d'autant plus important que le coefficient de tension de surface est fort (équivalent à petit nombre de Weber). Pour les petites échelles de la turbulence, l'énergie I_2 est plus importante pour $W_e < \infty$ que pour $W_e = \infty$, ce qui indique que l'interface joue un rôle de générateur pour les plus petites échelles de la turbulence. Ainsi, il existe un transfert d'énergie des grandes échelles de la turbulence vers les petites échelles à $W_e < \infty$. Les forces de tension de surface sont responsables de ce transfert. L'examen de la table 9.1 montre que,

$\frac{t}{T_e}$	W_e	$I_1 = \int_0^{k_c} E(k) dk$	$I_2 = \int_{k_c}^{k_{max}} E(k) dk$	$I_3 = \int_0^{k_{max}} E(k) dk$	$\frac{I_1}{I_3}$	$\frac{I_2}{I_3}$
3	∞	$6.03 \cdot 10^{-3}$	$1.00 \cdot 10^{-5}$	$6.04 \cdot 10^{-3}$	0.998	0.002
	110	$5.96 \cdot 10^{-3}$	$1.00 \cdot 10^{-5}$	$5.97 \cdot 10^{-3}$	0.998	0.002
	63	$5.91 \cdot 10^{-3}$	$1.00 \cdot 10^{-5}$	$5.92 \cdot 10^{-3}$	0.998	0.002
	19	$5.72 \cdot 10^{-3}$	$6.00 \cdot 10^{-5}$	$5.78 \cdot 10^{-3}$	0.990	0.01
	2	$5.66 \cdot 10^{-3}$	$6.00 \cdot 10^{-5}$	$5.72 \cdot 10^{-3}$	0.990	0.01
6	∞	$1.75 \cdot 10^{-3}$	ϵ	$1.75 \cdot 10^{-3}$	$1 - \epsilon$	ϵ
	110	$1.70 \cdot 10^{-3}$	$1.00 \cdot 10^{-5}$	$1.71 \cdot 10^{-3}$	0.994	0.006
	63	$1.67 \cdot 10^{-3}$	$1.00 \cdot 10^{-5}$	$1.68 \cdot 10^{-3}$	0.994	0.006
	19	$1.61 \cdot 10^{-3}$	$4.00 \cdot 10^{-5}$	$1.65 \cdot 10^{-3}$	0.976	0.024
	2	$1.65 \cdot 10^{-3}$	$8.00 \cdot 10^{-5}$	$1.73 \cdot 10^{-3}$	0.954	0.046
13	∞	$4.75 \cdot 10^{-4}$	$3.00 \cdot 10^{-6}$	$4.78 \cdot 10^{-4}$	0.994	0.006
	110	$4.54 \cdot 10^{-4}$	$4.00 \cdot 10^{-6}$	$4.58 \cdot 10^{-4}$	0.991	0.009
	63	$4.48 \cdot 10^{-4}$	$6.00 \cdot 10^{-6}$	$4.54 \cdot 10^{-4}$	0.987	0.013
	19	$4.36 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$4.54 \cdot 10^{-4}$	0.960	0.04
	2	\emptyset	\emptyset	$5.13 \cdot 10^{-4}$	\emptyset	\emptyset
20	∞	$2.29 \cdot 10^{-4}$	$2.00 \cdot 10^{-6}$	$2.31 \cdot 10^{-4}$	0.991	0.009
	110	$2.17 \cdot 10^{-4}$	$3.00 \cdot 10^{-6}$	$2.20 \cdot 10^{-4}$	0.986	0.014
	63	$2.14 \cdot 10^{-4}$	$5.00 \cdot 10^{-6}$	$2.19 \cdot 10^{-4}$	0.977	0.023
	19	$2.11 \cdot 10^{-4}$	$1.10 \cdot 10^{-5}$	$2.22 \cdot 10^{-4}$	0.95	0.05
	2	\emptyset	\emptyset	$2.85 \cdot 10^{-4}$	\emptyset	\emptyset

TABLE 9.1 – Répartition de l'énergie cinétique turbulente entre les petites et les grandes échelles de la turbulence pour différents W_e et à différents instants.

à l'exception de $W_e = 2$ aux temps longs, I_3 pour $W_e < \infty$ est inférieure à I_3 pour $W_e = \infty$. Ainsi, l'amortissement aux grandes échelles est plus important que l'augmentation aux petites échelles, ce qui provoque une décroissance globale de l'énergie cinétique turbulente due aux forces de tension de surface. Pour le cas $W_e = 2$ aux temps longs, l'augmentation globale de l'énergie cinétique turbulente a été expliquée précédemment.

Ainsi, de retour à la figure 9.15, le transfert d'énergie des grandes échelles vers les petites échelles est d'autant plus fort que le temps est long. Ce transfert est significatif à partir de $t/T_e > 3$, à un instant où l'interaction interface/turbulente devient significative. Pour $t/T_e \in [0; 3]$, l'interface n'a pas d'impact sur la distribution spectrale de l'énergie cinétique turbulente.

Dans le cas des grands nombres de Weber où l'interface est divisée en gouttelettes, la distribution des tailles des gouttelettes est corrélée avec l'augmentation de l'énergie cinétique turbulente aux petites échelles. Sur les figures 9.3 et 9.4, pour $W_e = 110$ et $W_e = 19$, la majorité des gouttes ont leur diamètre D tel que $D/\Delta x \leq 30$, ce qui correspond à $k\eta|_{t/T_e=3} \geq 0.2$. Ainsi, dans le cas où l'interface est divisée, ($W_e = 110, 63$ et 19), le transfert d'énergie entre l'interface et l'énergie cinétique turbulente s'opère aux échelles spatiales qui correspondent aux tailles de gouttes les plus nombreuses.

Le transfert d'énergie dû aux effets capillaires devra être pris en considération dans le développement futur de modèles LES. La contribution sous-maille du couplage interface/turbulence est une augmentation de l'énergie cinétique turbulente provenant des petites échelles.

9.5 Prise en compte de la distance à l'interface et spectres d'énergie 2D

Un transfert d'énergie des grandes échelles de la turbulence vers les petites échelles a été mis en évidence. Ce transfert a été établi pour le domaine tout entier. Dans cette partie, on se propose de prendre en compte la distance à l'interface comme paramètre. Pour ce faire, le domaine de calcul est divisé en 10 plans parallèles à la nappe initiale plane. \mathbf{e}_z est le vecteur normal unitaire des 10 plans. On désigne par $\alpha(\tilde{z})$ la fonction de densité de la phase $\phi < 0$ à $z = \tilde{z}$. Si $\alpha(\tilde{z}) = 0$ alors le plan $z = \tilde{z}$ est totalement en dehors de la nappe. Si $\alpha(\tilde{z}) = 1$ alors le plan $z = \tilde{z}$ est totalement à l'intérieur de la nappe. Et si $0 < \alpha(\tilde{z}) < 1$, alors le plan $z = \tilde{z}$ coupe l'interface. Sur la figure 9.17, $\alpha(z)$ est représenté en fonction de z/L_b pour différents W_e et à $t/T_e = 13$. L_b désigne la taille de la boîte. La nappe initiale (à $t = 0$) s'étend de $z = 0.025L_b$ à $z = +0.025L_b$. Sur la figure 9.17, la position des 10 plans est également représentée. Par des raisons évidentes de symétries, seuls les plans 1 à 5 seront étudiés. Les conclusions pour les plans 6 à 10 sont les mêmes. Le plan 1 est le plan le plus loin de l'interface. Le plan 5 est le plan le plus proche. Pour tous les nombres de W_e , les plans 1 et 2 ne coupent jamais l'interface. Les plans 3 et 4 coupent l'interface pour $W_e = 110, 63$, et 19 . Pour $W_e = 2$, le seul plan qui coupe l'interface est le plan 5 et les autres plans sont tous en dehors de la nappe. Pour $W_e = 0.2$ aucun des plans ne coupe l'interface. En effet, sous l'effet de très fortes tensions de surface, la nappe subit peu de déformations et l'interface est parallèle aux plans.

Sur la figure 9.18, les spectres d'énergie 2D sont représentés pour différents W_e à $t/T_e = 13$. Les spectres 2D sont calculés dans les plans 1 à 5. Plus les spectres sont calculés dans un

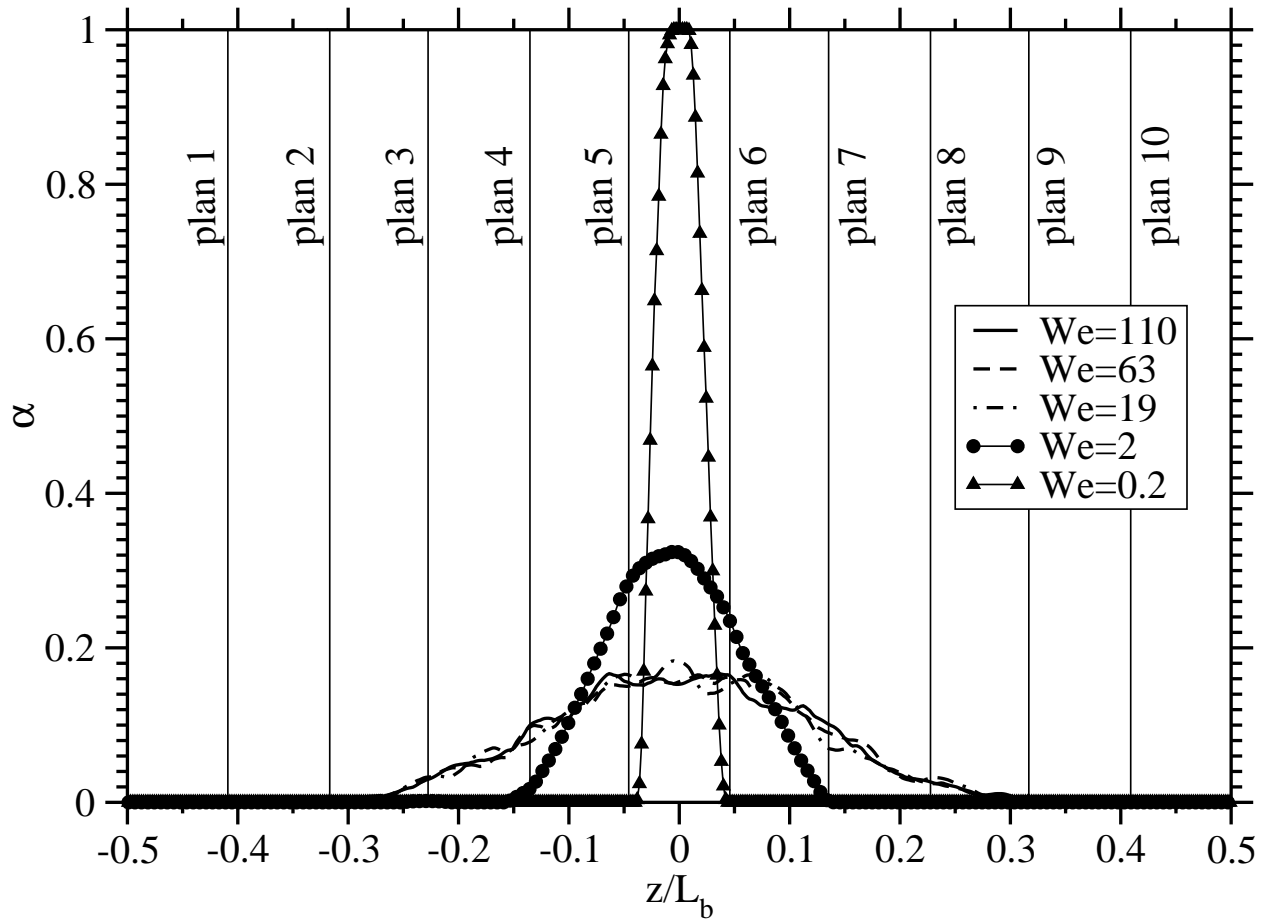


FIGURE 9.17 – $\alpha(z)$ en fonction de z/L_b . L_b est la taille de la boîte. $\frac{t}{T_e} = 13$

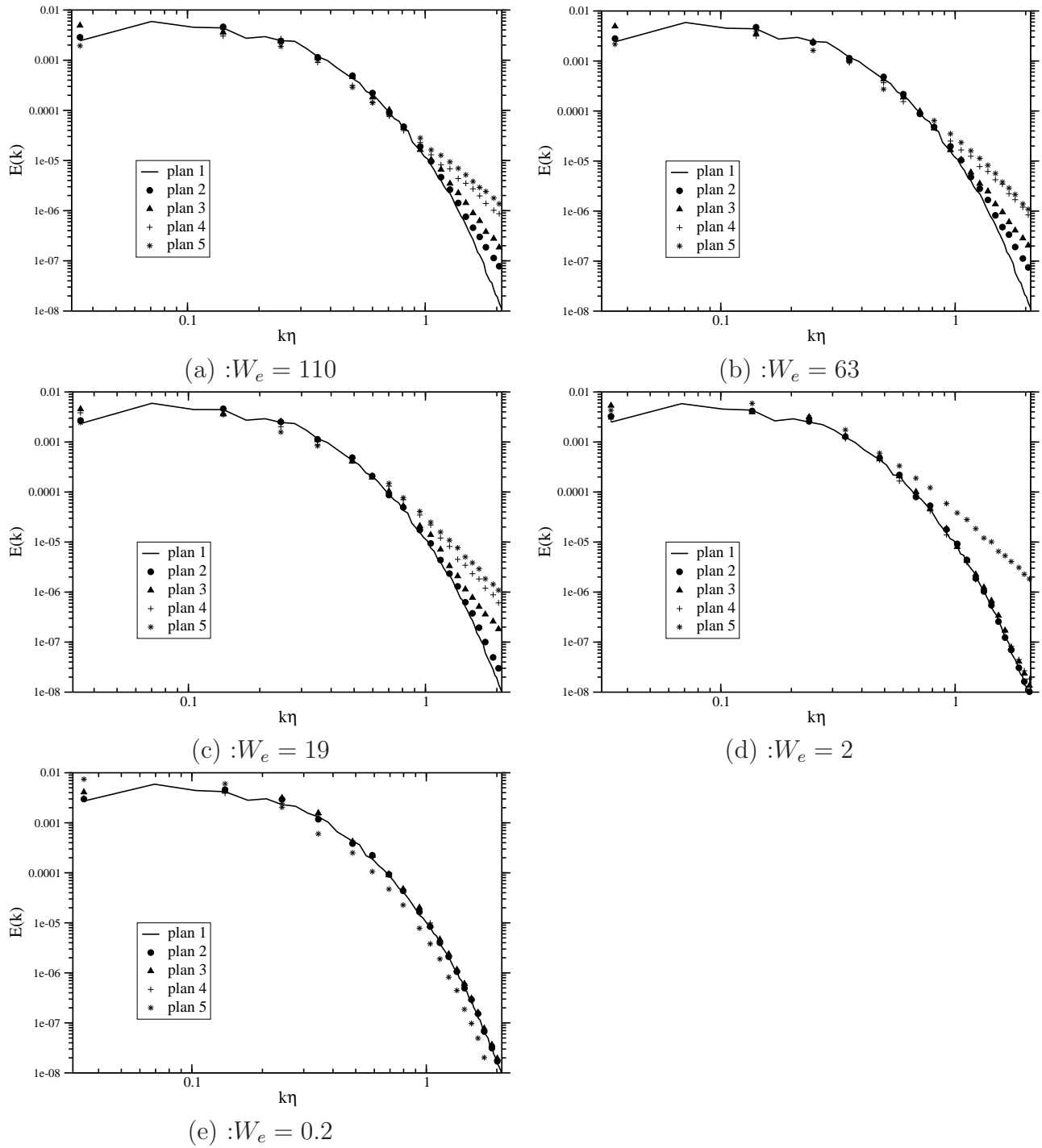


FIGURE 9.18 – Spectres d'énergie 2D. Découpage par plans. $\frac{t}{T_e} = 13$

plan proche de l'interface, plus l'énergie aux petites échelles est forte. Le transfert d'énergie des grandes échelles vers les petites échelles est d'autant plus important qu'on s'approche de l'interface. Pour $W_e = 110, 63$ and 19 , les plans 4 et 5 sont les plans où le transfert d'énergie est le plus fort. A ces Weber, $\alpha = 0.1$ pour le plan 4 et $\alpha = 0.16$ pour le plan 5 (vois Fig. 9.17). Ainsi, dans ces deux plans, les deux phases $\phi < 0$ et $\phi > 0$ sont à la fois présentes, et les interactions sont fortes via l'interface. Sur la figure 9.18, pour $W_e = 2$, le transfert d'énergie entre les grandes échelles et les petites échelles est significatif seulement dans le plan 5. Une fois encore, ceci est consistant avec la figure 9.17 où le plan 5 est le seul qui coupe l'interface dans le cas $W_e = 2$. Sur la figure 9.18, des conclusions analogues peuvent être tirées pour $W_e = 0.2$: aucun des plans ne traverse l'interface et le transfert d'énergie entre grandes et petites échelles est limité au voisinage immédiat de l'interface. Pour $W_e = 0.2$, même le plan 5 est trop loin de l'interface. La figure 9.18 indique que le transfert d'énergie des grandes échelles vers les petites dû aux forces de tension de surface est spatialement limité au voisinage de l'interface.

L'étalement spectral du transfert d'énergie est maintenant étudié. Pour réaliser cette étude, le rapport $\frac{E(k, W_e = 19, t)}{E(k, W_e = \infty, t)}$ est calculé pour différents nombres d'onde k et à différents instants. $W_e = 19$ est choisi pour mener l'étude et des conclusions similaires peuvent être tirées pour les autres Weber. Sur la figure 9.19, à $t/T_e = 5$, $\frac{E(k)_{W_e=19}}{E(k)_{W_e=\infty}} \gg 1$ pour les grands nombres d'onde (pour $k\eta_k > 1.5$) et seulement les plus petites échelles de la turbulence bénéficient du transfert d'énergie précédemment mis en lumière. Pour des temps plus longs ($t/T_e = 13$ et 26), $\frac{E(k)_{W_e=19}}{E(k)_{W_e=\infty}} \gg 1$ pour $k\eta_k > 1$. Ainsi, des échelles de plus en plus grandes reçoivent de l'énergie de la part des plus grandes échelles, à cause des effets de tension de surface. Ceci témoigne d'un étalement spectral du transfert d'énergie.

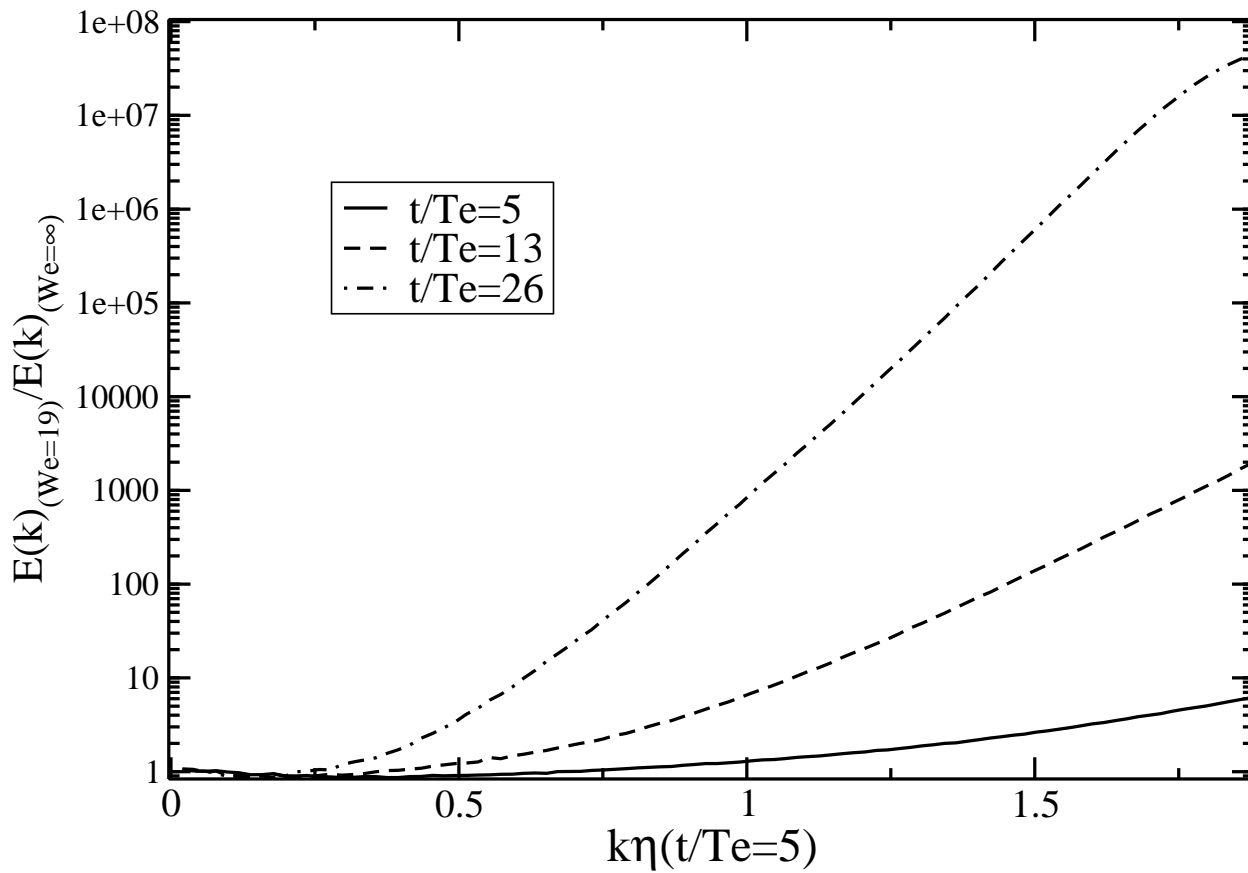


FIGURE 9.19 – $\frac{E(k)_{We=19}}{E(k)_{We=\infty}}$ à différents $\frac{t}{T_e}$.

Chapitre 10

Conclusion sur la partie

Cette étude est une contribution à la compréhension du couplage entre la turbulence et les effets capillaires. Une THI libre a été choisie pour mener cette étude. Dans un premier temps, l'écoulement de THI monophasique a été calibré pour obtenir des statistiques convergées sur l'isotropie, les échelles de longueur et les paramètres turbulents. Puis, une nappe initialement plane a été ajoutée à l'écoulement, et une étude paramétrique sur le coefficient de tension de surface (W_e) a été menée. D'un point de vue qualitatif, deux types d'interactions entre la turbulence et l'interface ont été observées avec un cas de transition.

Pour les grands nombres de Weber, l'interface est déchirée par les forces de tension de surface. L'interface est largement divisée et, dans ce cas, le transfert d'énergie de la turbulence vers l'interface est utilisé pour la coalescence des petites gouttelettes en plus grosses gouttes. Pour les grands W_e aux temps courts, une augmentation des contraintes tangentielles de Reynolds est observée près de l'interface alors que la composante normale décroît. Aux temps plus longs, les composantes normales et tangentielles de Reynolds décroissent. Un transfert d'énergie s'opère entre les grandes échelles de la turbulence et les petites échelles. Ce transfert prédomine au voisinage de l'interface et est piloté par les échelles caractéristiques des tailles de gouttelettes qui forment le milieu diphasique. Lorsque W_e diminue, un cas de transition apparaît qui correspond encore à une interface divisée. Dans ce cas, les gouttes sont suffisamment grosses pour être indépendantes les unes des autres. L'énergie interfaciale reçue de l'écoulement turbulent est rendue à l'écoulement et amplifiée par les forces de tension de surface. Pour des nombres de Weber encore plus faibles, l'interface reste plane et oscille suivant le régime d'ondes de surface. La fréquence caractéristique des ondes de surface est retrouvée dans les bilans d'énergie cinétique. Pour tous les nombres de Weber, une zone d'anisotropie et de vorticit  importante est localis e dans le voisinage de l'interface.

Troisième partie
Analyse a priori des DNS

La partie précédente a permis d'avancer dans la compréhension de l'interaction interface/turbulence. L'utilisation d'une D.N.S. hautement résolue a permis de comprendre les interactions à très petites échelles. Le recours systématique aux D.N.S. n'est pas envisageable pour l'instant ailleurs que dans un domaine purement académique. Une alternative prometteuse est l'utilisation de la L.E.S. Malheureusement, comme on l'a déjà soulevé, les modèles L.E.S. diphasiques (lorsqu'ils existent) n'apportent pas la qualité requise. De plus, ils sont souvent restreint à un type d'écoulement et manquent ainsi d'universalité. C'est dans ce but d'apporter une contribution dans la modélisation L.E.S., que la base de données D.N.S., obtenue et largement exploitée dans la partie précédente, va être filtrée pour une analyse *a priori*.



Chapitre 11

Filtrage des équations conditionné par la phase

Sommaire

11.1 Le problème du filtrage classique en présence d'une discontinuité	189
11.1.1 Présentation du filtrage classique	189
11.1.2 Contribution sous-maille du saut lié à la discontinuité	191
11.2 Filtrage des équations conditionné par la phase	192
11.3 Filtrage de l'équation d'advection de la level-set	194

Traditionnellement, pour une analyse *a priori* d'une base de données DNS, afin de développer des modèles LES, on a recours à un filtre défini comme un produit de convolution. Pour que le filtrage ait de bonnes propriétés comme la commutation avec les symboles de dérivation et ainsi éviter l'apparition de nouveaux termes sous-maille, le noyau de convolution est choisi indépendant de l'espace et du temps. Ceci implique que le filtrage peut s'effectuer à cheval de l'interface, au travers d'une discontinuité (la pression par exemple). En effet, dans notre approche level-set/ghost-fluid, la pression est discontinue (contrairement à la technique CSF où le saut de pression est régularisé sur quelques cellules autour de l'interface) et ainsi le filtrage de la pression (ou de son gradient) à travers l'interface induit des précautions. On s'aperçoit qu'en plus de la partie turbulente, le saut lié à la discontinuité de pression contribue aux fluctuations sous-maille. C'est ce qu'on se propose de montrer dans la suite.

11.1 Le problème du filtrage classique en présence d'une discontinuité

11.1.1 Présentation du filtrage classique

La séparation entre les échelles résolues et les échelles sous-mailles (non résolues) est réalisée par l'application d'un filtre passe-haut en échelles (c'est-à-dire passe-bas en fréquence) sur les équations de Navier-Stokes [122]. Ce filtrage est représenté mathématiquement dans l'espace physique comme un produit de convolution. Alors, la partie résolue $\bar{f}(\mathbf{x}, t)$ (au sens

de la LES) d'une variable $f(\mathbf{x}, t)$ est définie par :

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{x}', t') G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') dt' d\mathbf{x}' \quad (11.1)$$

Le noyau de convolution G caractérise le filtre utilisé. Il est associé aux échelles de coupure temporelle $\bar{\tau}_c$ et spatiale $\bar{\Delta}$. L'action du filtre sur la variable f peut être notée $\bar{f} = G f$. Dans le but d'appliquer le filtrage aux équations de Navier-Stokes, trois propriétés doivent être vérifiées pour G :

– si f est une constante, alors on a $\bar{f} = f$. Ceci équivaut à :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{x}', t - t') dt' d\mathbf{x}' = 1$$

– l'opération de filtrage commute avec les dérivées :

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial s}} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial s} \quad s = \mathbf{x}, t$$

cette propriété est vraie si f est une fonction continue.

– l'opération de filtrage est linéaire :

$$\overline{f_1 + f_2} = \bar{f}_1 + \bar{f}_2$$

La seule approche qui est effectivement menée en pratique est le filtrage spatial. Nous nous limiterons donc à une approche spatiale de la LES par la suite. Trois filtres homogènes et isotropes sont classiquement utilisés pour effectuer la séparation d'échelles en espace : les filtres boîte, gaussien et porte.

Le filtre boîte

En dimension 1, le filtre boîte est défini ainsi :

$$G(x - x') = \begin{cases} \frac{1}{\bar{\Delta}} & \text{si } |x - x'| \leq \frac{\bar{\Delta}}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

La fonction de transfert \hat{G} de G est donnée par $\hat{G} = \frac{\sin(k\bar{\Delta}/2)}{k\bar{\Delta}/2}$. Ainsi, le filtre boîte est localisé en espace mais pas en fréquence. Une coupure nette à la fréquence $1/\bar{\Delta}$ n'est pas garantie avec le filtre boîte.

Le filtre gaussien

En dimension 1, le filtre gaussien est défini ainsi :

$$G(x - x') = \left(\frac{\gamma}{\pi \bar{\Delta}^2} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{-\gamma |x - x'|^2}{\bar{\Delta}^2} \right)$$

Sa fonction de transfert est donnée par $\hat{G}(k) = \exp \left(-\frac{\bar{\Delta}^2 k^2}{4\gamma} \right)$.

Le filtre porte

Le filtre porte est défini de la façon suivante :

$$G(x - x') = \frac{\sin(k_c(x - x'))}{k_c(x - x')} \quad \text{avec } k_c = \pi/\bar{\Delta}$$

et a pour fonction de transfert :

$$\hat{G}(k) = \begin{cases} 1 & \text{si } |k| \leq k_c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Cette fois-ci, le filtre porte est localisé en fréquence mais pas en espace (le support n'est pas compact en espace). Donc le filtre porte est nécessairement tronqué lors d'une discrétisation numérique sur un domaine de calcul compact. Cette tronquature a des répercussions sur la fonction de transfert du filtre et sur sa localisation fréquentielle.

11.1.2 Contribution sous-maille du saut lié à la discontinuité

Cette partie s'inspire très largement de l'article de Sagaut [123]. Soit u une variable turbulente définie dans un espace Ω lui-même divisé en deux sous-espaces Ω_0 et Ω_1 . Les deux sous-espaces sont séparés l'un de l'autre par la frontière Γ . La variable u oscille autour d'une valeur moyenne U_0 dans Ω_0 et U_1 dans Ω_1 , de telle sorte qu'on peut écrire :

$$u(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} u_0(\mathbf{x}, t) = U_0(t) + u_0''(\mathbf{x}, t) & \mathbf{x} \in \Omega_0 \\ u_1(\mathbf{x}, t) = U_1(t) + u_1''(\mathbf{x}, t) & \mathbf{x} \in \Omega_1 \end{cases}$$

où $u_0''(\mathbf{x}, t)$ et $u_1''(\mathbf{x}, t)$ représentent respectivement les fluctuations turbulentes de u dans Ω_0 et Ω_1 . On applique alors à u le filtrage classique représenté par l'équation (11.1).

$$\bar{u}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')u(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'$$

On a alors :

$$\begin{aligned} \bar{u}(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega_0} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')(U_0 + u_0''(\mathbf{x}')) d\mathbf{x}' + \int_{\Omega_1} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')(U_1 + u_1''(\mathbf{x}')) d\mathbf{x}' \\ &= U_0 \int_{\Omega_0} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' + \int_{\Omega_0} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')u_0''(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \\ &\quad + U_1 \int_{\Omega_1} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' + \int_{\Omega_1} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')u_1''(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \\ &= \underbrace{[U] \int_{\Omega_1} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' + U_0}_{I} \\ &\quad + \underbrace{\int_{\Omega_0} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')u_0''(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' + \int_{\Omega_1} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')u_1''(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'}_{II} \end{aligned}$$

où $[U]$ désigne le saut de la valeur moyenne à travers l'interface $[U] = U_1 - U_0$. Le terme I ne dépend pas de la fluctuation turbulente u_i'' , $i = 0, 1$, mais seulement de la discontinuité du champ moyen. La fluctuation sous-maille $u'(\mathbf{x}, t) = u(\mathbf{x}, t) - \bar{u}(\mathbf{x}, t)$ est alors égale à :

$$u'(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} u_0''(\mathbf{x}, t) - II - [U] \int_{\Omega_1} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' & \mathbf{x}' \in \Omega_0 \\ u_1''(\mathbf{x}, t) - II + [U] \int_{\Omega_1} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' & \mathbf{x}' \in \Omega_1 \end{cases} \quad (11.2)$$

Ainsi, le saut du champ moyen apparaît en tant que contribution dans la définition de la fluctuation sous-maille. La contribution du saut dans la fluctuation peut dominer la partie turbulente de la fluctuation sous-maille, ce qui invalide les modèles LES utilisés qui supposent que les fluctuations sous-mailles sont d'origine turbulente. Nous retrouvons ce problème pour le filtrage de la pression qui est discontinue à la traversée de l'interface, ou bien pour le filtrage des termes visqueux dont la dérivée est discontinue à travers l'interface ($\phi = 0$).

Afin d'éviter d'inclure le saut de la variable moyenne dans la fluctuation sous-maille, nous proposons d'utiliser un filtrage conditionné par la phase.

11.2 Filtrage des équations conditionné par la phase

On considère un domaine Ω divisé en deux sous-domaines Ω_1 et Ω_2 :

$$\begin{cases} \Omega = \Omega_1 + \Omega_2 \\ \Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset \end{cases}$$

Le sous-domaine Ω_k définit la phase k . A partir des noyaux G définis dans le cas du filtrage volumique, on définit la fraction volumique filtrée conditionnée par la phase k par :

$$\theta_k(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_k} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}'$$

θ_1 et θ_2 vérifient $\theta_1 + \theta_2 = 1$. Alors, le filtrage $\overline{\cdot}^\phi$ conditionné par la phase k est défini par [65, 43] :

$$\overline{\psi_k(\mathbf{x}, t)}^\phi = \frac{1}{\theta_k(\mathbf{x}, t)} \int_{\Omega_k} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_k(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}' \quad (11.3)$$

Le point de départ est les équations de Navier-Stokes écrites sous leur forme conservative et vérifiées dans chacune des phases k ($k = 1$ et 2). Si \mathbf{u}_k et \mathbf{T}_k désignent respectivement la vitesse et le tenseur des contraintes dans la phase k , alors le système d'équations qu'on considère est le suivant :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \mathbf{u}_k) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) &= \nabla \cdot \mathbf{T}_k \end{aligned} \quad (11.4)$$

où $\mathbf{g} = 0$ ici. Ce système est écrit de la façon compacte suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \psi_k) + \nabla \cdot (\rho_k \psi_k \mathbf{u}_k) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_k \quad (11.5)$$

11.2 Filtrage des équations conditionné par la phase

C'est l'équation (11.5) qui va être filtrée à partir de (11.3). Pour commuter la dérivée temporelle avec l'opération de filtrage, on applique la règle de Leibniz :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_k(t)} \rho_k G \psi_k d\mathbf{x}' = \int_{\Omega_k(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k G \psi_k) d\mathbf{x}' + \oint_{\partial\Omega_k(t)} G \rho_k \psi_k (\mathbf{u}^I \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I) d\mathbf{x}'$$

où \mathbf{u}^I et $\mathbf{e}_{n,k}^I$ représentent la vitesse de l'interface et le vecteur unitaire normal à l'interface (dirigé vers l'extérieur de $\partial\Omega_k(t)$). Ainsi, le filtrage conditionné par la phase de l'équation (11.5) aboutit à (voir [21] pour le détail des calculs) :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\theta_k \rho_k \psi_k}) + \nabla \cdot (\overline{\theta_k \rho_k \psi_k \mathbf{u}_k}) + \nabla \cdot (\overline{\theta_k \rho_k \mathbf{j}_k}) = - \oint_{\partial\Omega_k} G \rho_k \psi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}^I) \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I d\mathbf{x}' - \oint_{\partial\Omega_k} G \rho_k \mathbf{j}_k \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I d\mathbf{x}'$$

$\rho_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}^I) \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I$ représente le taux de transfert de masse interfacial. Dans notre cas, ce terme est nul. L'équation précédente se réécrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\theta_k \rho_k \psi_k}) + \nabla \cdot (\overline{\theta_k \rho_k \psi_k \mathbf{u}_k}) + \nabla \cdot (\overline{\theta_k \rho_k \mathbf{j}_k}) = - \oint_{\partial\Omega_k} G \rho_k \mathbf{j}_k \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I d\mathbf{x}'$$

En utilisant la moyenne de Favre définie par $\overline{\rho^\phi \psi^\phi} = \overline{\rho} \tilde{\psi}^\phi$, et en définissant le tenseur sous-maille ainsi : $\boldsymbol{\tau}_k = \overline{\theta_k \rho_k \tilde{\psi}^\phi \tilde{\mathbf{u}}_k^\phi} - \overline{\theta_k \rho_k \psi_k \mathbf{u}_k}^\phi$, on obtient les équations de la LES :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\theta_k \rho_k \tilde{\psi}_k^\phi}) + \nabla \cdot (\overline{\theta_k \rho_k \tilde{\psi}_k^\phi \tilde{\mathbf{u}}_k^\phi}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k + \nabla \cdot (\overline{\theta_k \rho_k \tilde{\mathbf{j}}_k^\phi}) = - \oint_{\partial\Omega_k} G \rho_k \mathbf{j}_k \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I d\mathbf{x}'$$

Et finalement, les équations LES pour la conservation de la masse et de quantité de mouvement s'écrivent :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\overline{\theta_k \rho_k \tilde{\mathbf{u}}_k^\phi}) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\theta_k \rho_k \tilde{\mathbf{u}}_k^\phi}) + \nabla \cdot (\overline{\theta_k \rho_k \tilde{\mathbf{u}}_k^\phi \otimes \tilde{\mathbf{u}}_k^\phi}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k - \nabla \cdot (\overline{\theta_k \mathbf{T}_k}) &= - \oint_{\partial\Omega_k} G \rho_k \mathbf{T}_k \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I d\mathbf{x}' \end{aligned} \quad (11.6)$$

On définit un filtrage surfacique conditionné par la phase ainsi :

$$\overline{(\psi_k(\mathbf{x}, t))}_s = \frac{\oint_{\partial\Omega_k} \psi_k(\mathbf{x}', t) G(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d\mathbf{x}'}{\oint_{\partial\Omega_k} G(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d\mathbf{x}'}$$

Le dénominateur de la formule précédente peut être réinterprété grâce aux paramètres géométriques du domaine [65] :

$$\oint_{\partial\Omega_k} G(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d\mathbf{x}' = \frac{\theta_k A_k}{V_k}$$

avec A_k et V_k les aires et volumes occupés par la phase k à l'instant t . Alors l'équation (11.6) se réécrit finalement :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\overline{\theta_k \rho_k \tilde{\mathbf{u}}_k^\phi}) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\theta_k \rho_k \tilde{\mathbf{u}}_k^\phi}) + \nabla \cdot (\overline{\theta_k \rho_k \tilde{\mathbf{u}}_k^\phi \otimes \tilde{\mathbf{u}}_k^\phi}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k - \nabla \cdot (\overline{\theta_k \mathbf{T}_k}) &= - \overline{(\mathbf{T}_k \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I)}_s \frac{\theta_k A_k}{V_k} \end{aligned} \quad (11.7)$$

avec $\boldsymbol{\tau}_k = \theta_k \overline{\rho_k^\phi} \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi} \otimes \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi} - \theta_k \overline{\rho_k} \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k^\phi$. Pour l'équation de quantité de mouvement, le second membre est un terme de couplage inter-phase qu'il faut fermer. Une fois ce terme et le tenseur $\boldsymbol{\tau}$ modélisés, les équations de la LES sont fermées. On pose :

$$\boldsymbol{\lambda}_k = \overline{(\mathbf{T}_k)_s} \cdot \overline{(\mathbf{e}_{n,k}^I)_s} - \overline{(\mathbf{T}_k \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I)_s}$$

et le système précédent 11.7 devient :

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot \left(\theta_k \overline{\rho_k^\phi} \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi} \right) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\theta_k \overline{\rho_k^\phi} \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi}) + \nabla \cdot (\theta_k \overline{\rho_k^\phi} \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi} \otimes \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k - \nabla \cdot (\theta_k \overline{\mathbf{T}_k^\phi}) &= - \left[\overline{(\mathbf{T}_k)_s} \cdot \overline{(\mathbf{e}_{n,k}^I)_s} - \boldsymbol{\lambda}_k \right] \frac{\theta_k A_k}{V_k} \end{aligned} \quad (11.8)$$

Le tenseur \mathbf{T}_k se décompose ainsi :

$$\mathbf{T}_k = -p_k \mathbf{I} + \mu_k (\nabla \mathbf{u}_k + {}^T \nabla \mathbf{u}_k)$$

Alors le tenseur sous-maille lié au couplage inter-phase $\boldsymbol{\lambda}_k$ fait intervenir deux contributions :

$$\boldsymbol{\lambda}_k = \boldsymbol{\lambda}_k^{press} + \boldsymbol{\lambda}_k^{visc}$$

où :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\lambda}_k^{press} = \overline{(p_k \mathbf{I})_s} \cdot \overline{(\mathbf{e}_{n,k}^I)_s} - \overline{(p_k \mathbf{I} \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I)_s} \\ \boldsymbol{\lambda}_k^{visc} = \mu_k \left(\overline{(\nabla \mathbf{u}_k)_s} + \overline{({}^T \nabla \mathbf{u}_k)_s} \right) \cdot \overline{(\mathbf{e}_{n,k}^I)_s} - \overline{(\mu_k (\nabla \mathbf{u}_k + {}^T \nabla \mathbf{u}_k) \cdot \mathbf{e}_{n,k}^I)_s} \end{cases}$$

Nous n'avons pas intégré le gradient surfacique dans nos calculs et nous supposons ici que $\overline{(\nabla \mathbf{u}_k)_s} = \nabla^s (\overline{\mathbf{u}_k})_s$ où ∇^s est l'opérateur gradient surfacique.

11.3 Filtrage de l'équation d'advection de la level-set

On rappelle l'équation d'advection de la fonction level-set ϕ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0$$

La fonction level-set étant parfaitement continue ainsi que le champ de vitesses (même à la traversée de l'interface), le problème du filtrage conditionné par la phase ne se pose pas ici et l'équation d'advection de ϕ peut être filtrée par un filtre volumique classique. Il apparaît alors un terme sous-maille que l'on note τ_ϕ .

$$\frac{\partial \overline{\phi}}{\partial t} + \overline{\mathbf{u}} \cdot \nabla \overline{\phi} = \tau_\phi \quad (11.9)$$

avec $\tau_\phi = \overline{\mathbf{u}} \cdot \nabla \overline{\phi} - \overline{\mathbf{u} \cdot \nabla \phi}$.

Chapitre 12

Filtrage *a priori* des DNS

Sommaire

12.1 Paramètres du filtrage	195
12.2 Filtrage <i>a priori</i> et résultats	196

Dans le chapitre précédent, nous avons introduit le filtrage conditionné par la phase pour les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Il en ressort des termes de sous maille :

- $\boldsymbol{\tau}_k$ qui est le terme de sous-maille issu du filtrage du terme non linéaire. On retrouve ce terme en monophasique et sa modélisation LES fait l’objet d’une littérature très vaste. Nous testerons des modèles de la littérature pour appréhender les limites de ces modèles lors de leur application dans le domaine diphasique.
- $\boldsymbol{\lambda}_k$ qui est issu des termes de couplage entre les deux phases. Ce terme est spécifique au caractère diphasique. $\boldsymbol{\lambda}_k$ peut être décomposé en deux contributions $\boldsymbol{\lambda}_k^{press}$ et $\boldsymbol{\lambda}_k^{visc}$ liées au saut du tenseurs des contraintes à l’interface. $\boldsymbol{\lambda}_k^{press}$ est le terme sous-maille lié au saut de pression, alors que $\boldsymbol{\lambda}_k^{visc}$ est lié au saut visqueux. La contribution sous-maille du vecteur normal à l’interface se répercute dans $\boldsymbol{\lambda}_k^{press}$ et $\boldsymbol{\lambda}_k^{visc}$.

Nous allons utiliser les DNS précédemment calculées pour réaliser un filtrage *a priori* et comparer les différents termes sous-maille selon leur amplitude.

12.1 Paramètres du filtrage

Le système d’équation 11.8 est considéré pour filtrer les équations. Le noyau G retenu est le filtre boîte donné par (en 1D) :

$$G(x - \xi) = \begin{cases} \frac{1}{\bar{\Delta}} & \text{si } |x - \xi| \leq \frac{\bar{\Delta}}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

où $\bar{\Delta}$ est la longueur de coupure. Dans nos calculs, $\bar{\Delta}$ prend trois valeurs distinctes $\bar{\Delta} = 3\Delta x$, $\bar{\Delta} = 5\Delta x$ et $\bar{\Delta} = 7\Delta x$.

Si $\|\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k\|$, $\|\boldsymbol{\lambda}_k^{press}\|$ et $\|\boldsymbol{\lambda}_k^{visc}\|$ désignent respectivement les normes de $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k$, $\boldsymbol{\lambda}_k^{press}$ et $\boldsymbol{\lambda}_k^{visc}$, alors conformément à la définition 9.3 page 160, on étudiera les grandeurs $\langle \|\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k\| \rangle_\phi$,

$\langle \|\boldsymbol{\lambda}_k^{press}\| \rangle_\phi$ et $\langle \|\boldsymbol{\lambda}_k^{visc}\| \rangle_\phi$. Ces grandeurs sont adimensionnées par le maximum du terme convectif résolu, à savoir $\|\nabla \cdot (\theta_k \overline{\rho_k^\phi} \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi} \otimes \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi})\|_\infty$, comme dans Vincent *et al.* [163].

L'étude de ce paragraphe se concentre donc sur l'étude des termes suivants que nous noterons T_1 , T_2 et T_3 :

$$\left\{ \begin{array}{l} T_1 \equiv \frac{\langle \|\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k\| \rangle_\phi}{\|\nabla \cdot (\theta_k \overline{\rho_k^\phi} \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi} \otimes \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi})\|_\infty} \\ T_2 \equiv \frac{\langle \|\boldsymbol{\lambda}_k^{press}\| \rangle_\phi}{\|\nabla \cdot (\theta_k \overline{\rho_k^\phi} \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi} \otimes \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi})\|_\infty} \frac{\theta_k A_k}{V_k} \\ T_3 \equiv \frac{\langle \|\boldsymbol{\lambda}_k^{visc}\| \rangle_\phi}{\|\nabla \cdot (\theta_k \overline{\rho_k^\phi} \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi} \otimes \widetilde{\mathbf{u}_k^\phi})\|_\infty} \frac{\theta_k A_k}{V_k} \end{array} \right.$$

12.2 Filtrage *a priori* et résultats

Les figures 12.1 et 12.2 représentent les trois termes de sous-maille explicités juste auparavant. Pour ces figures, $\overline{\Delta} = 7\Delta x$ et une comparaison est effectuée entre différents nombres de Weber. Deux temps de simulations ont été retenus : $t/T_e = 5$ correspond à un temps court où les déformations de l'interface n'engendrent pas des courbures trop importantes (sauf pour les plus grands W_e). $t/T_e = 13$ est un temps plus avancé où l'interface est fortement déformée avec de fortes courbures (voir la figure 9.2 page 157) par exemple. Nous n'avons pas représenté de temps plus longs. En effet, aux grands temps, le niveau de turbulence n'est plus suffisant pour aboutir à des conclusions intéressantes sur le terme T_1 . Les termes T_2 et T_3 restent forts à cause des contributions sous-maille du vecteur normal qui sont importantes. En revanche, l'amplitude de T_1 diminue avec le niveau global de turbulence. C'est pourquoi nous nous sommes restreints à des temps modérés. Sur les figures 12.1 et 12.2 les termes de sous-maille sont représentés en fonction de $\phi/\overline{\Delta}$.

Pour tous les W_e , on retrouve les résultats du monophasique loin de l'interface ($\phi/\delta \gg 1$). En effet, les termes T_2 et T_3 liés au couplage inter-phase sont nuls et on retrouve une valeur constante pour T_1 pour $\phi/\overline{\Delta} > 1$. Cette valeur est indépendante du coefficient de tension de surface et vaut environ 10% et 5% du terme convectif résolu pour respectivement $t/T_e = 5$ et $t/T_e = 13$.

Notre intérêt se porte alors sur $|\frac{\phi}{\overline{\Delta}}| < 1$. Pour le temps court $t/T_e = 5$, on isole deux types de comportement en fonction du nombre de Weber. Pour $W_e = 110, 63, 19$ le terme sous-maille T_2 est localement plus fort que T_1 dans un voisinage autour de l'interface de largeur $\overline{\Delta}$. Cette tendance est d'autant plus vraie que W_e est grand, c'est-à-dire lorsque le coefficient de tension de surface est petit. Si on s'intéresse à la figure 9.2 page 157 qui représente l'isosurface $\phi = 0$ (c'est-à-dire l'interface) à $t/T_e = 5$, on remarque que les courbures sont d'autant plus fortes que W_e est grand. En effet, au départ quand l'interface est très faiblement déformée, les forces capillaires sont moindre à grand nombre de Weber, ce qui autorise de fortes déformations avec de fortes courbures. Une fois les courbures locales fortes, la force de tension de surface peut devenir forte. Ainsi, à grand W_e , les fluctuations sous-maille du vecteur normal à l'interface sont plus importantes car l'interface est plus fortement déformée. Ce sont les contributions sous-mailles dues à $\mathbf{e}_{n,k}^I$ qui rendent T_2 prédominant pour les forts

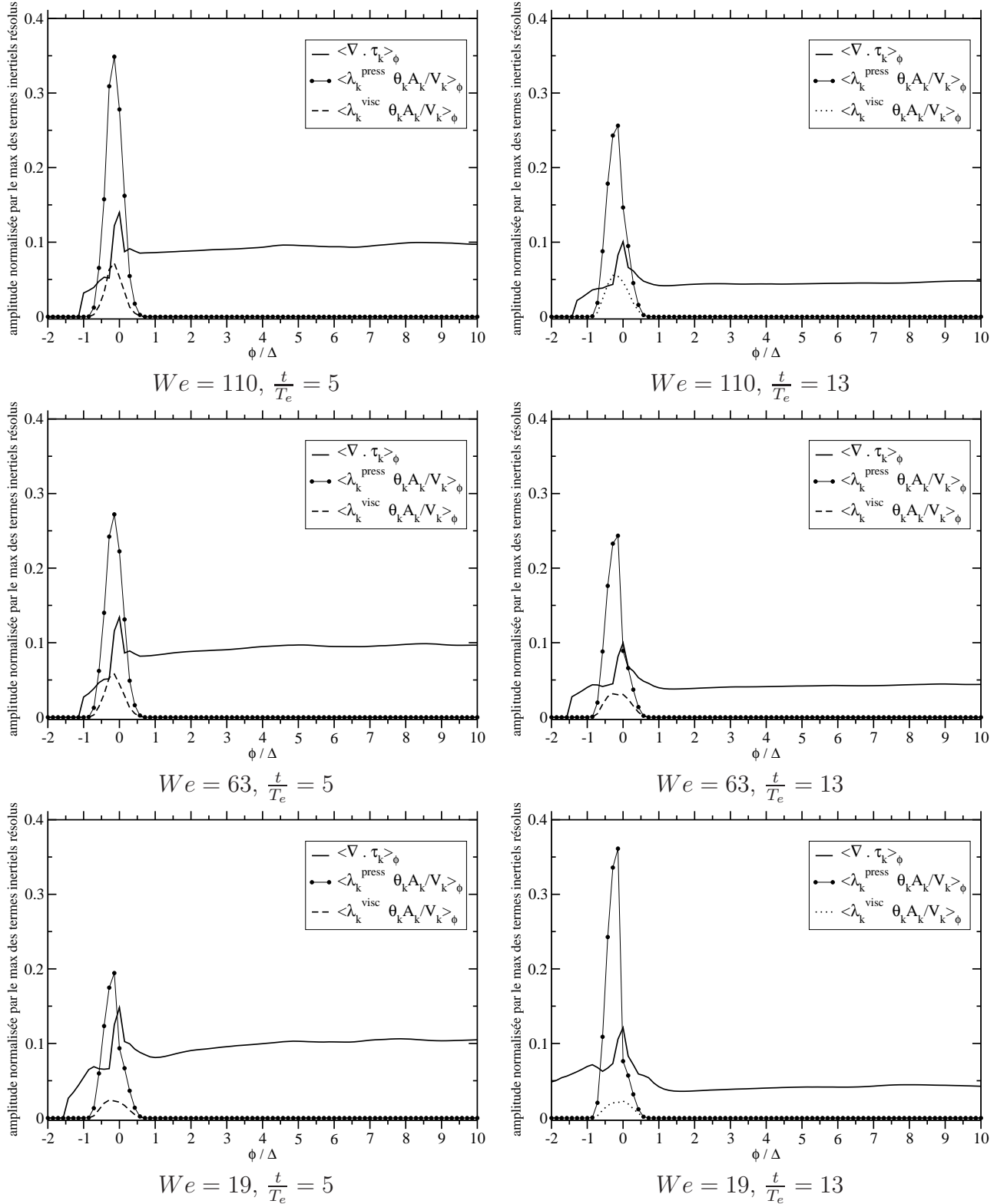


FIGURE 12.1 – Comparaison des termes sous-maillés τ_k , λ_k^{press} et λ_k^{visc} . Tous les termes sont normalisés par le maximum de la norme du terme inertiel résolu. (1/2)

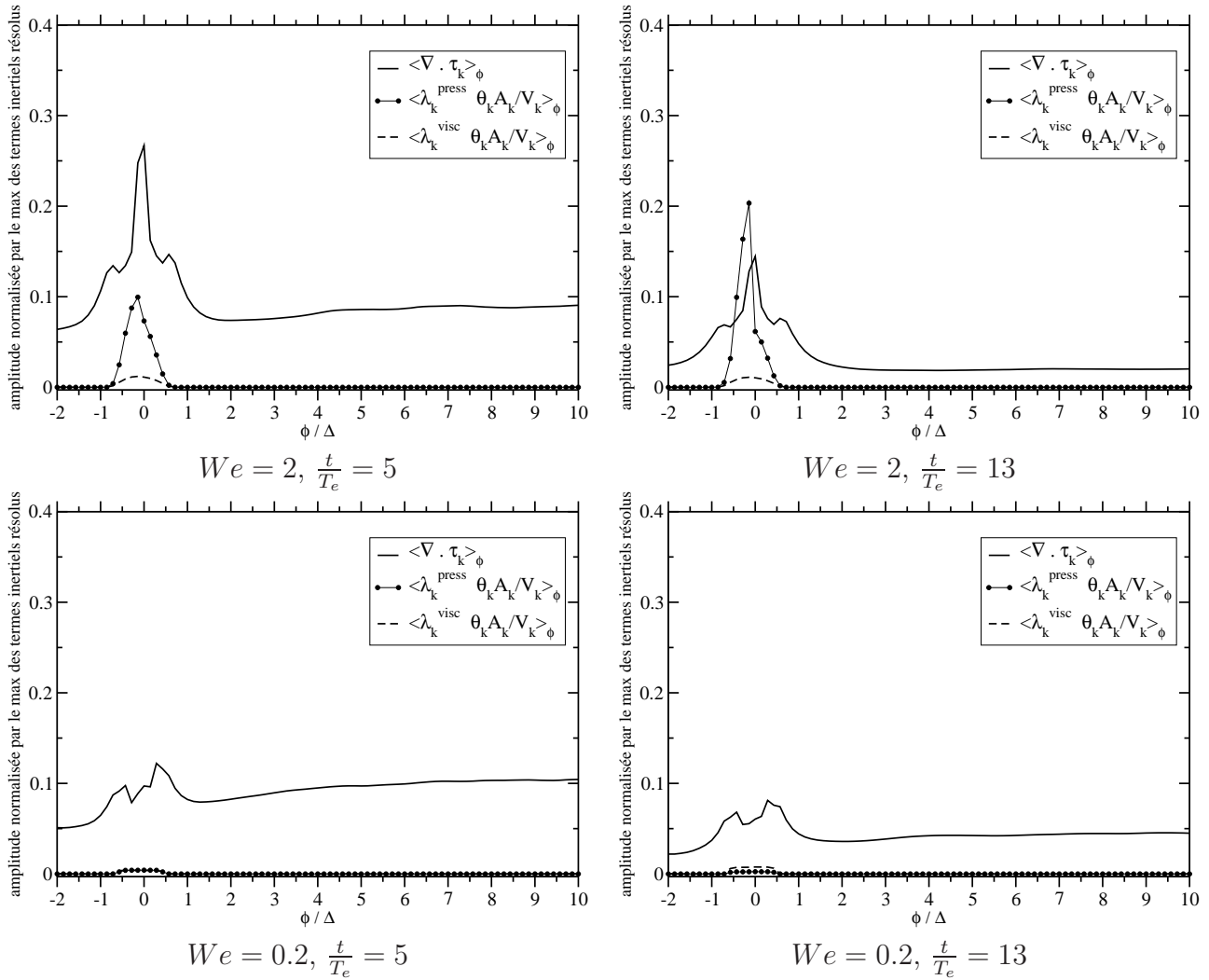


FIGURE 12.2 – Comparaison des termes sous-maillés τ_k , λ_k^{press} et λ_k^{visc} . Tous les termes sont normalisés par le maximum de la norme du terme inertiel résolu. (2/2)

W_e , bien que le coefficient de tension de surface soit faible. Alors, la contribution sous-maille de $\mathbf{e}_{n,k}^I$ est plus importante que l'effet propre du coefficient de surface. Ainsi, un modèle pour T_2 devra forcément dépendre de la configuration locale et devra s'adapter à la topologie de l'interface. Toujours pour le temps court $t/T_e = 5$, les cas $W_e = 2$ et $W_e = 0.2$ sont différents. Le terme prédominant à l'interface est ici T_1 . Pour le cas $W_e = 0.2$, le terme T_2 est même négligeable devant T_1 . Ceci est à relier avec la figure 9.2 page 157. Pour $W_e = 0.2$ l'interface est déformée uniquement par les ondes de surface et ainsi la contribution sous-maille de $\mathbf{e}_{n,k}^I$ est pratiquement nulle, ce qui explique que $T_2/T_1 \ll 1$. Encore une fois, ceci confirme que c'est bien la partie non-résolue de $\mathbf{e}_{n,k}^I$ qui pilote le terme interfacial T_2 , et non pas la valeur du coefficient de tension de surface. En effet, $W_e = 0.2$ correspond au cas où le coefficient de tension de surface σ est le plus fort, mais où la contribution sous-maille de $\mathbf{e}_{n,k}^I$ est la plus faible (très faible déformation de l'interface). On retrouve cette tendance dans [163]. Ainsi, un modèle pour T_2 devra intégrer la dynamique de l'interface (à travers la courbure par exemple).

Pour le temps plus long $t/T_e = 13$, les tendances observées au temps $t/T_e = 5$ se confirment. Pour les forts nombres de Weber (110, 63 et 19), T_1 diminue avec la décroissance globale de l'énergie cinétique turbulente. En revanche, T_2 reste fort et augmente même pour le cas $W_e = 19$ par rapport à $t/T_e = 5$. En effet, pour les trois Weber les plus forts, l'interface est de plus en plus divisée avec le temps et la surface est plus grande, ce qui augmente la contribution de A_k et explique l'augmentation de T_2 . Pour $W_e = 2$, T_2 devient le terme dominant par rapport à T_1 à $t/T_e = 13$. La contribution sous-maille de $\mathbf{e}_{n,k}^I$ devient alors suffisante pour imposer une forte valeur à T_2 . En revanche, pour $W_e = 0.2$, T_2 reste négligeable par rapport à T_1 , ce qui est en accord avec la figure 9.2 page 157 qui montre que l'interface reste faiblement déformée.

Pour ce qui est du terme T_3 , sa contribution est la plus faible parmi les trois termes. T_3 reste toujours plus petit que T_1 . L'amplitude de T_3 ne dépend pas du W_e comme le terme T_2 . Nous négligerons sa contribution par la suite.

Chapitre 13

Fermeture et modélisation des termes de sous-maille

Sommaire

13.1 Modélisation fonctionnelle	202
13.1.1 Modèles basés sur les échelles résolues	203
13.1.2 Modèles basés sur l'énergie à la coupure	204
13.1.3 Modèles basés sur les échelles sous-maille	204
13.1.4 Présentation de quelques modèles	205
13.1.5 Amélioration des modèles dans l'espace physique	208
13.2 Modélisation structurelle	210
13.2.1 Développements formels en série	210
13.2.2 Modèle à équations de transport	211
13.2.3 Modèles déterministes des structures sous-maille	212
13.2.4 Modèles basés sur l'hypothèse de similarité d'échelles	212
13.3 Modélisation mixte	214
13.4 Modélisation des tenseurs τ_k et τ_ϕ	215
13.5 Conclusion	218

La simulation aux grandes échelles permet de réduire le degré de liberté des équations en ne résolvant que les échelles les plus grandes (au-delà d'une échelle de coupure). Une séparation s'opère entre les échelles résolues et les échelles de sous-maille. Pour que la dynamique des échelles résolues soit correcte, l'action des échelles de sous-mailles sur les échelles résolues doit être prise en compte via un modèle : le modèle de sous-maille. Ce modèle tente de "mimer" le comportement des petites échelles à partir de la seule information contenue dans les échelles résolues.

Il existe deux grandes stratégies de modélisation LES. La modélisation *structurelle* du terme de sous-maille consiste à approcher le tenseur de sous-maille à partir d'une évaluation de u' ou d'un développement formel en série. On cherche alors une relation \mathcal{R} telle que $u' = \mathcal{R}(\bar{u})$. L'approche *structurelle* ne nécessite pas d'informations sur la nature physique de l'interaction entre les échelles. La modélisation *fonctionnelle* consiste à modéliser l'action des termes de sous-maille sur la variable résolue, en introduisant un terme ayant le même comportement physique (dissipatif par exemple) que le tenseur de sous-maille. L'approche

fonctionnelle nécessite de connaître la nature de l'interaction entre les échelles. Pour cela, il est nécessaire que l'effet des petites échelles sur les grosses ait un caractère universel et indépendant des grandes échelles.

On se propose de faire ici un rappel des principales modélisations fonctionnelles et structurelles. Les tenseurs de sous-maille que l'on cherche à modéliser ici sont ceux issus des termes convectifs des équations, à savoir τ_k pour l'équation de Navier-Stokes et τ_ϕ pour l'équation d'advection de ϕ .

13.1 Modélisation fonctionnelle

Les modèles de sous-maille relevant de l'approche fonctionnelle reposent sur l'hypothèse suivante [122] :

Hypothèse 1 *L'action des échelles de sous-maille sur les échelles résolues est essentiellement une action énergétique, et donc le seul bilan des transferts énergétiques entre ces deux gammes d'échelles suffit à décrire l'action des échelles de sous-maille.*

Ainsi la modélisation consiste à intégrer les effets de dissipation ou de production d'énergie. Lorsqu'une approche dans l'espace physique est utilisée, la modélisation repose sur le mécanisme de cascade d'énergie vers les échelles de sous-maille, ce qui fait émerger le concept de viscosité sous-maille par l'hypothèse suivante [122] :

Hypothèse 2 *Le mécanisme de transfert d'énergie des échelles résolues vers les échelles de sous-maille est analogue aux mécanismes moléculaires représentés par le terme de diffusion faisant apparaître la viscosité ν .*

Alors la modélisation du mécanisme de cascade d'énergie adopte une structure semblable à celle de la diffusion moléculaire, en remplaçant la viscosité classique ν par la viscosité sous-maille ν_{SM} . Si $\boldsymbol{\tau}$ représente ici $\boldsymbol{\tau}_k$ ou $\boldsymbol{\tau}_\phi$, on pose alors :

$$\tau_{ij}^D = \tau_{ij} - \frac{1}{3}\tau_{kk}\delta_{ij}$$

et $\boldsymbol{\tau}^D$ est alors modélisé par :

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^D = \nabla \cdot (\nu_{SM} (\nabla \bar{\mathbf{u}} + {}^T \nabla \bar{\mathbf{u}}))$$

Le problème de fermeture consiste donc à exprimer la viscosité sous-maille ν_{SM} en fonction de la variable résolue $\bar{\mathbf{u}}$. Les modèles de viscosité de sous-maille peuvent être classés selon trois catégories :

- Modèles basés sur les échelles résolues. ν_{SM} est alors évaluée à partir de quantités globales reliées aux échelles résolues.
- Modèles basés sur l'énergie à la coupure. ν_{SM} est résolue à partir de l'énergie de la plus haute fréquence résolue. L'information est alors localisée en fréquence et est a priori plus pertinente pour décrire les phénomènes à la coupure que les quantités globales résolues.
- Modèles basés sur les échelles sous-maille. Les informations liées aux échelles sous-maille sont directement utilisées.

On se propose maintenant de présenter chacune de ces approches.

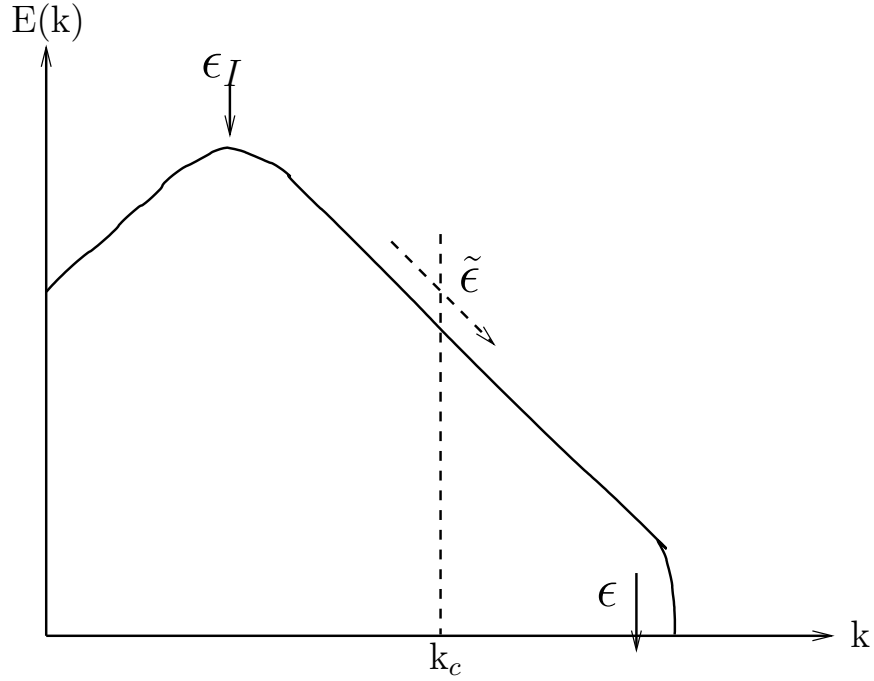


FIGURE 13.1 – Dynamique de l'énergie cinétique dans l'espace spectral. D'après Sagaut [122]. L'énergie est injectée au taux ϵ_I . Le taux de transfert à travers la coupure au nombre d'onde k_x est noté $\tilde{\epsilon}$. Le taux de dissipation par les effets visqueux est noté classiquement ϵ .

13.1.1 Modèles basés sur les échelles résolues

Ces modèles sont de la forme :

$$\nu_{SM} = \nu_{SM}(\bar{\Delta}, \tilde{\epsilon})$$

où $\bar{\Delta}$ est la longueur caractéristique du filtre et $\tilde{\epsilon}$ le taux d'énergie instantané à travers la coupure. Une analyse dimensionnelle montre que :

$$\nu_{SM} \propto \tilde{\epsilon}^{1/3} \bar{\Delta}^{4/3}$$

ou encore, en prenant la moyenne de l'expression précédente :

$$\langle \nu_{SM} \rangle \propto \langle \tilde{\epsilon} \rangle^{1/3} \bar{\Delta}^{4/3}$$

L'hypothèse d'équilibre local suppose qu'il n'y a pas d'accumulation d'énergie à une fréquence quelconque et que l'équilibre spectral est constant. Ainsi, en adoptant les notations du schéma 13.1, on obtient :

$$\langle \epsilon_I \rangle = \langle \tilde{\epsilon} \rangle = \langle \epsilon \rangle$$

Et on a alors :

$$\langle \nu_{SM} \rangle \propto \langle \epsilon \rangle^{1/3} \bar{\Delta}^{4/3} \quad (13.1)$$

En utilisant la relation suivante :

$$\langle 2|\bar{S}|^2 \rangle = \langle 2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij} \rangle = \int_0^{k_c} 2k^2 E(k) dk \quad k_c = \frac{\pi}{\bar{\Delta}}$$

Dans le cadre des hypothèses de Kolmogorov pour une THI, le spectre peut s'exprimer ainsi :

$$E(k) = K_0 \langle \epsilon \rangle^{2/3} k^{-5/3}$$

et alors :

$$\langle 2|\overline{S}|^2 \rangle = \frac{3}{2} K_0 \pi^{4/3} \langle \epsilon \rangle^{2/3} \overline{\Delta}^{-4/3}$$

d'où

$$\langle \epsilon \rangle^{1/3} = \left(\frac{2}{3K_0} \right)^{1/2} \pi^{-2/3} \overline{\Delta}^{2/3} \langle 2|\overline{S}|^2 \rangle^{1/2}$$

En utilisant l'expression 13.1, on obtient finalement :

$$\begin{aligned} \langle \nu_{SM} \rangle &\propto \overline{\Delta}^2 \langle 2|\overline{S}|^2 \rangle^{1/2} \\ \langle \nu_{SM} \rangle &= (C\overline{\Delta})^2 \langle 2|\overline{S}|^2 \rangle^{1/2} \end{aligned}$$

où C est une constante à déterminer.

13.1.2 Modèles basés sur l'énergie à la coupure

En faisant l'hypothèse d'un spectre de Kolmogorov en THI et que la coupure a lieu dans la zone inertielle, alors :

$$E(k_c) = K_0 \langle \epsilon \rangle^{2/3} k_c^{-5/3}$$

En substituant dans 13.1, on obtient :

$$\langle \nu_{SM} \rangle = C \sqrt{\frac{E(k_c)}{k_c}}$$

13.1.3 Modèles basés sur les échelles sous-maille

Les modèles ici sont de la forme :

$$\langle \nu_{SM} \rangle = \langle \nu_{SM} \rangle (\overline{\Delta}, \langle q_{sm}^2 \rangle, \langle \epsilon \rangle)$$

où $\langle q_{sm}^2 \rangle$ est l'énergie cinétique des échelles sous-maille et $\langle \epsilon \rangle$ le taux de dissipation visqueuse. Cette formulation a recours à des échelles propres aux modes sous-mailles (via $\langle q_{sm}^2 \rangle$ et $\langle \epsilon \rangle$), et ainsi le recours à l'hypothèse d'équilibre local n'est plus nécessaire. Encore une fois, une simple analyse dimensionnelle fournit :

$$\langle \nu_{SM} \rangle = C_\alpha \langle \epsilon \rangle^{\alpha/3} \langle q_{sm}^2 \rangle^{(1-\alpha)/2} \overline{\Delta}^{1+\alpha/3} \quad (13.2)$$

où α est un paramètre de pondération. Le problème de fermeture consiste à déterminer les grandeurs $\langle \epsilon \rangle$ et $\langle q_{sm}^2 \rangle$. Pour ce faire, une équation d'évolution pour chacune des grandeurs peut être introduite, ou bien ces grandeurs peuvent être calculées à partir des variables résolues.

Le tableau suivant résume les avantages et les inconvénients de chacune des approches :

approche	avantages	inconvénients
Modèles basés sur les échelles résolues	<ul style="list-style-type: none"> • Modèles exprimés en fonction des variables résolues • Facilité d'intégration numérique 	<ul style="list-style-type: none"> • $\langle \nu_{SM} \rangle$ est non nulle dès que le champ de vitesse présente des variations spatiales (même en laminaire et en DNS) • Action trop forte du modèle pour les écoulements turbulents faiblement développés (pas de zone inertielle)
Modèles basés sur l'énergie à la coupure	<ul style="list-style-type: none"> • nullité de $\langle \nu_{SM} \rangle$ si l'écoulement est bien résolu • Meilleure consistence physique que les modèles basés sur les grandes échelles 	<ul style="list-style-type: none"> • Problème de la détermination de l'énergie à la coupure dans l'espace physique
Modèles basés sur les échelles sous-maille	<ul style="list-style-type: none"> • Modes sous-mailles mieux décrits que dans les deux approches précédentes • Hypothèse d'équilibre local non nécessaire 	<ul style="list-style-type: none"> • Problème de fermeture de $\langle \epsilon \rangle$ et $\langle q_{sm}^2 \rangle$ (équation d'évolution ou expression à partir des variables résolues) • Besoin de plus de calculs

TABLE 13.1 – Avantages et inconvénients des différentes approche pour la modélisation fonctionnelle.

13.1.4 Présentation de quelques modèles

Nous nous proposons ici de présenter quelques modèles relevant de la modélisation fonctionnelle dans le cas isotrope qui appartiennent aux trois catégories présentées précédemment.

Modèle de Smagorinski

Le modèle de Smagorinski [134] est basé sur les grandes échelles. Le modèle est souvent utilisé sous forme locale en espace, c'est-à-dire que les relations vraies en moyenne sont en fait utilisées localement. A priori, ceci n'est pas très rigoureux puisque les transferts d'énergie à travers la coupure sont vérifiés en moyenne et non pas localement. Ainsi, d'après ce qui a été dit précédemment sur les modèles basés sur les échelles résolues, le modèle de Smagorinski s'écrit :

$$\nu_{SM}(\mathbf{x}, t) = (C_s \overline{\Delta})^2 (2|\overline{S}(\mathbf{x}, t)|^2)^{1/2}$$

Les efforts se portent alors sur la détermination de la constante du modèle C_s . Souvent, la valeur de cette constante est diminuée par rapport à la valeur théorique pour compenser la non-nullité du gradient de vitesse.

Modèle basé sur l'énergie cinétique sous-maille

Dans l'équation 13.2, le paramètre α est pris à 0, et le modèle ne fait intervenir que l'énergie cinétique des échelles sous-maille.

$$\nu_{SM}(\mathbf{x}, t) = C_m \overline{\Delta} \sqrt{q_{sm}^2(\mathbf{x}, t)}$$

où q_{sm}^2 est l'énergie cinétique des modes sous-maille définie par $q_{sm}^2 = \frac{1}{2} \overline{(u_i(\mathbf{x}, t) - \bar{u}_i(\mathbf{x}, t))^2}$. Cette énergie constitue une variable supplémentaire et est évaluée en résolvant une équation d'évolution comme celle présentée ci-dessous (MacComb [95]) :

$$\frac{\partial q_{sm}^2}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial \bar{u}_j q_{sm}^2}{\partial x_j}}_I = \underbrace{-\tau_{ij} \bar{S}_{ij}}_{II} - \underbrace{C_1 \frac{q_{sm}^2}{\bar{\Delta}}}_{III} + \underbrace{C_2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\Delta} \sqrt{q_{sm}^2} \frac{\partial q_{sm}^2}{\partial x_j} \right)}_{IV} + \underbrace{\nu \frac{\partial^2 q_{sm}^2}{\partial x_j \partial x_j}}_V$$

où C_1 et C_2 sont deux constantes positives et les différents termes désignent :

- I : advection par les modes résolus
- II : production par les modes résolus
- III : dissipation turbulente
- IV : diffusion turbulente
- V : dissipation visqueuse

Modèle d'échelles mixtes

Ces modèles, définis par Ta Phuoc et Sagaut [120, 121], ont une triple dépendance en fonction de :

- la longueur de coupure $\bar{\Delta}$ du filtre
- les grosses structures du champ résolu
- les petites structures du champ résolu

Une analyse dimensionnelle permet alors de définir la viscosité sous-maille, définie à un paramètre α près :

$$\nu_{SM}(\alpha)(\mathbf{x}, t) = C_m |\mathcal{F}(\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t))|^\alpha (q_c^2)^{\frac{1-\alpha}{2}}(\mathbf{x}, t) \bar{\Delta}^{1+\alpha}$$

avec $\mathcal{F}(\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t))$ une fonction de la variable résolue $\bar{\mathbf{u}}$. L'énergie cinétique q_c^2 est évaluée dans l'espace physique de la façon suivante :

$$q_c^2(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} (\bar{u}_i(\mathbf{x}, t))' \frac{1}{2} (\bar{u}_i(\mathbf{x}, t))'$$

Le champ $(\bar{\mathbf{u}})'$ est appelé champ d'épreuve et représente la partie haute-fréquence du champ résolu. Il est défini à l'aide d'un second filtre appelé filtre test, représenté par $\tilde{\cdot}$ et associé à la longueur de coupure $\tilde{\Delta} > \bar{\Delta}$. On a alors naturellement :

$$(\bar{\mathbf{u}})' = \bar{\mathbf{u}} - \tilde{\mathbf{u}}$$

Voir la figure 13.2 tiré du livre de Sagaut [122] pour fixer $\bar{\Delta}$, $\tilde{\Delta}$, $\tilde{\mathbf{u}}$ et $(\bar{\mathbf{u}})'$. Alors, le modèle d'échelles mixtes peut être interprété de deux façons différentes :

- Comme un modèle basé sur l'énergie cinétique des échelles sous-maille (voir section 13.1.4) si l'hypothèse de similarité d'échelles de Bardina (décrite plus tard dans 13.2.4) est utilisée. En effet, elle nous permet de poser

$$q_c^2 \approx q_{SM}^2 \tag{13.3}$$

où q_{SM}^2 est l'énergie cinétique des échelles sous-maille. L'hypothèse nous permettant d'écrire 13.3 peut être raffinée dans le cas académique d'utilisation d'un spectre inertiel

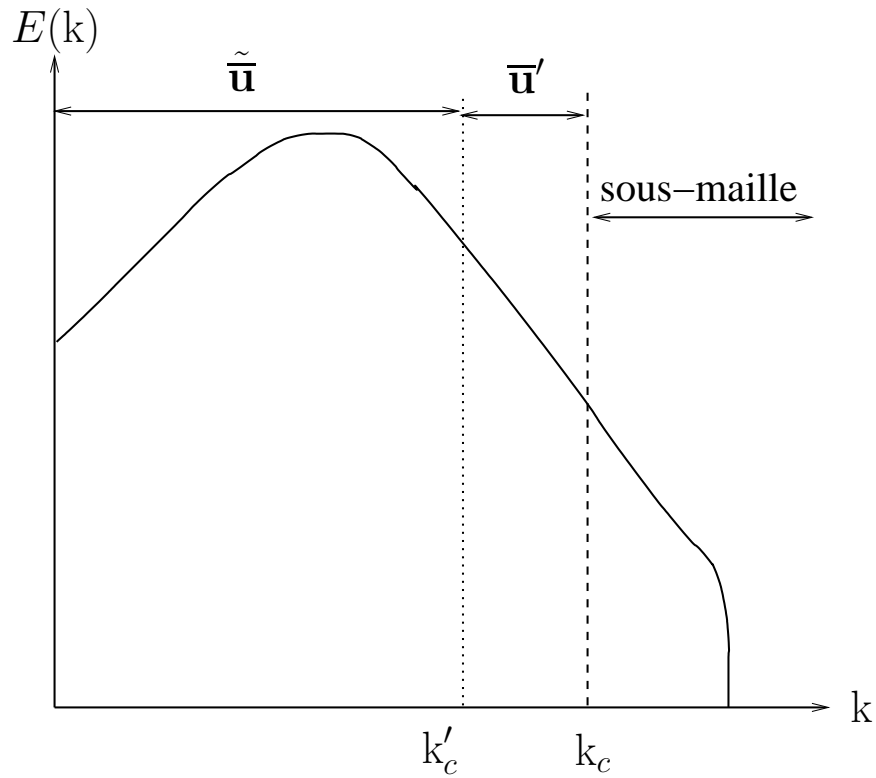


FIGURE 13.2 – Décomposition spectrale du double filtrage. D’après Sagaut [122]. $\tilde{\mathbf{u}}$: champ résolu au sens du filtre test. $(\bar{\mathbf{u}})'$: champ d’épreuve. \mathbf{u}' : échelles non résolues au sens du filtre initial.

de Kolmogorov ($E(k) = K_0 \epsilon^{2/3} k^{-5/3}$). En effet, en supposant que les deux coupures pour les filtres classique et test ont tous deux lieu dans la zone inertielle du spectre, alors on peut écrire :

$$q_c^2 = \int_{k'_c}^{k_c} E(k) dk = \frac{3}{2} K_0 \epsilon^{2/3} (k_c'^{-2/3} - k_c^{-2/3})$$

On a alors immédiatement :

$$q_c^2 = \beta q_{sm}^2 \quad \beta = \left[\left(\frac{k'_c}{k_c} \right)^{-2/3} - 1 \right]$$

L'hypothèse de similarité d'échelles est alors exacte pour $\beta = 1$, c'est-à-dire $k'_c = \frac{1}{\sqrt{8}} k_c$.
 – Comme un modèle basé sur l'énergie à la coupure. En effet, si on reprend le raisonnement précédent :

$$q_c^2 = \frac{3}{2} K_0 \epsilon^{2/3} (k_c'^{-2/3} - k_c^{-2/3}) = \frac{3}{2} \beta k_c E(k_c)$$

Ici encore, l'hypothèse de similarité d'échelles est exacte pour $k'_c = \frac{1}{\sqrt{8}} k_c$.

13.1.5 Amélioration des modèles dans l'espace physique

Les modèles précédemment présentés reposent sur des hypothèses assez fortes où l'écoulement est pleinement turbulent, homogène et isotrope et où la fréquence de coupure a lieu suffisamment loin dans la zone inertielle du spectre. Dans la cas d'écoulements en transition, fortement anisotropes ou fortement sous-résolus (c'est-à-dire qu'une grande partie de l'énergie cinétique est contenue dans les échelles sous-maille), le comportement des modèles est nettement moins bon.

De plus, un problème fondamental se pose pour des simulations spatiales qui utilisent des modèles basés sur l'énergie à la coupure ou sur les échelles sous-maille. En effet, l'information ne peut pas être localisée à la fois en espace et en fréquence. Par exemple, un écoulement fortement inhomogène nécessite une grande précision spatiale. Alors, une bonne résolution spectrale est difficile à obtenir, ce qui conduit à une majoration des erreurs notamment lors du calcul de l'énergie à la coupure (la fréquence de coupure ne peut pas alors être déterminée précisément). Un compromis espace/fréquence doit donc être trouvé, à moins d'enrichir l'information contenue dans la simulation en y adjoignant des variables supplémentaires (comme par exemple une équation d'évolution pour l'énergie cinétique sous-maille pour les modèles justement basés sur cette énergie des modes non résolus).

Nous allons maintenant présenter des techniques développées pour améliorer les modèles précédemment exposés. Ces améliorations ont pour but une meilleure adaptation du modèle aux caractéristiques locales du écoulement.

Procédure dynamique de calcul des constantes des modèles sous-maille

Cette technique est basée sur l'extraction d'un champ d'épreuve à partir des échelles résolues, par l'application d'un filtre test. On se propose ici de commenter la procédure dynamique de Germano-Lilly [41, 79]. Le modèle de Smagorinski est adapté en ajustant la

constante en chaque point et à chaque instant. La constante du modèle C_d est maintenant dépendante du temps et de l'espace : $C_d = C_d(\mathbf{x}, t)$.

On pose $\boldsymbol{\tau}$ et \mathbf{T} respectivement les tenseurs sous-maille correspondant au premier et au second niveau de filtrage. Le premier niveau de filtrage est associé à la longueur de coupure $\overline{\Delta}$, et le dernier à la longueur de coupure $\widetilde{\Delta}$. On a alors sans problème :

$$\begin{aligned}\tau_{ij} &= \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j} \\ T_{ij} &= \widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}\end{aligned}$$

On définit alors le tenseur $\mathbf{L} = \mathbf{T} - \widetilde{\boldsymbol{\tau}}$. Ainsi :

$$L_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}$$

Le tenseur \mathbf{L} peut être calculé à partir du champ résolu. L'hypothèse est alors faite que les deux tenseurs $\boldsymbol{\tau}$ et \mathbf{T} peuvent être modélisés au moyen du même modèle qui comprendra la même constante C_d pour les deux niveaux de filtrage. On a alors :

$$\begin{aligned}\tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} &= C_d \beta_{ij} \\ T_{ij} - \frac{1}{3} T_{kk} \delta_{ij} &= C_d \alpha_{ij}\end{aligned}$$

où $\boldsymbol{\alpha}$ et $\boldsymbol{\beta}$ désignent les modèles sous-maille privés de leur constante. Pour le modèle de Smagorinski, on a :

$$\begin{aligned}\beta_{ij} &= -2 \overline{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S}_{ij} \\ \alpha_{ij} &= -2 \widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}| \widetilde{S}_{ij}\end{aligned}$$

D'après la définition de \mathbf{L} , on a :

$$L_{ij} - \frac{1}{3} L_{kk} \delta_{ij} = C_d \alpha_{ij} - \widetilde{C_d} \beta_{ij}$$

En faisant l'approximation $\widetilde{C_d} \beta_{ij} = C_d \widetilde{\beta}_{ij}$, on définit un résidu \mathbf{E} ainsi :

$$E_{ij} = L_{ij} - \frac{1}{3} L_{kk} \delta_{ij} - C_d \alpha_{ij} + C_d \widetilde{\beta}_{ij}$$

et on cherche à minimiser ce résidu \mathbf{E} pour déterminer C_d . Germano propose de contracter l'expression précédente avec le tenseur des contraintes résolues pour trouver une valeur unique pour C_d . Lilly calcule la constante C_d par une méthode de moindres carrés.

Les modèles dont la constante est calculée par cette méthode sont dits dynamiques. Le *modèle dynamique* à proprement parlé est le modèle de Smagorinski dans lequel la constante est calculée de façon dynamique.

Fonctions d'amortissement pour la zone de proche paroi

La présence d'une paroi modifie la dynamique de la turbulence de proche paroi (voir [105]). La paroi empêche en effet aux petites échelles de se développer. La longueur caractéristique des modes de sous-maille doit être réduite dans la zone de proche paroi et ainsi

la viscosité sous-maille du modèle doit être réduite à proximité de la paroi. Si on analyse une couche limite canonique (voir l'ouvrage de Cousteix [27] pour une description détaillée de la couche limite), on peut définir les lois de décroissance des composantes de la vitesses et des tensions sous-maille. Pour une analyse asymptotique, voir l'ouvrage de Sagaut [122]. Il en ressort pour le modèle de viscosité sous-maille que :

$$\langle \nu_{SM} \rangle \propto z^3$$

où z est la distance à la paroi. Les modèles basés sur les seules grandes échelles ne vérifient pas ce comportement. Ils sont modifiés par l'introduction de fonctions d'amortissement. Parmi ces fonctions d'amortissement, on peut citer celle de van Driest :

$$f(z) = 1 - \exp(-zu_\tau/25\nu)$$

où u_τ est la vitesse de frottement. On peut également citer la fonction de Piomelli [110] :

$$f(z) = (1 - \exp(-(zu_\tau/25\nu)^3))^{1/2}$$

qui autorise une décroissance en z^3 de la viscosité sous-maille proche de la paroi.

Dans notre cas, il n'y a pas présence d'une paroi solide, mais d'une interface qui, comme on l'a montré dans la partie précédente, modifie également les caractéristiques de la turbulence au voisinage de l'interface. Dans les chapitres suivants, nous montrerons en effet que les modèles de sous-maille que nous avons testés souffrent du manque de pertinence au voisinage de l'interface.

13.2 Modélisation structurelle

Contrairement à la modélisation fonctionnelle, les modèles issus de la modélisation structurelle sont établis sans connaissance préalable sur la nature des interactions entre les échelles sous-maille et les échelles résolues. Dans son ouvrage, Sagaut [122] regroupe ces modèles en plusieurs catégories :

- Les modèles issus de développements en série
- Les modèles basés sur une équation de transport pour les composantes du tenseur de sous-maille
- Les modèles construits à partir de modèles déterministes pour les structures sous-maille
- Les modèles basés sur l'hypothèse de similarité d'échelles

13.2.1 Développements formels en série

Cette méthode ne fait appel à aucune connaissance de la physique de l'écoulement, mais repose sur un développement en série des différents termes de l'équation de Navier-Stokes.

On considère alors le développement de Taylor de la variable ϕ au point x (on se restreint ici à une présentation 1D) :

$$\phi(y) = \sum_{k=0}^n \frac{(y-x)^k}{k!} \frac{\partial^k \phi}{\partial x^k}(x) + o((y-x)^k)$$

L'opération de filtrage ainsi définie :

$$\bar{\phi}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(y)G(x-y) dy$$

est appliquée au développement de Taylor précédent :

$$\begin{aligned}\bar{\phi}(x) &= \sum_{k=0}^{E(n/2)} \frac{1}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} \phi(x)}{\partial x^{2k}} \int_{-\infty}^{+\infty} z^{2k} G(z) dz + o(x^{n+1}) \\ \bar{\phi}(x) &= \sum_{k=0}^{E(n/2)} \frac{1}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} \phi(x)}{\partial x^{2k}} \alpha^{(2k)} + o(x^{n+1})\end{aligned}$$

où $E(\cdot)$ désigne ici la partie entière et $\alpha^{(n)}$ est défini ainsi :

$$\alpha^{(n)} = \int_{-\infty}^{+\infty} z^n G(z) dz = O(\bar{\Delta}^n)$$

On réécrit ce filtrage sous forme d'opérateur :

$$\bar{\phi} = \left(Id + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\bar{\Delta}^{2k}}{(2k)!} \frac{\partial^{2k}}{\partial x^{2k}} \right) \phi$$

En inversant cette relation et en la tronquant à l'ordre p , on obtient :

$$\phi = \left(Id + \sum_{k=1}^p \frac{C_k}{(2k)!} \bar{\Delta}^{2k} \frac{\partial^{2k}}{\partial x^{2k}} \right) \bar{\phi}$$

où les C_k sont des coefficients à déterminer. Cette expression permet d'exprimer toutes les contributions en fonction du champ résolu.

13.2.2 Modèle à équations de transport

On propose ici l'approche de Deardorff [29] où on résout une équation d'évolution pour chacune des composantes du tenseur de sous-maille. L'approche est formellement analogue à la modélisation statistique en deux points. Ainsi le tenseur sous-maille τ_{ij} est réduit au tenseur de Reynolds sous-maille R_{ij} . On obtient alors une équation de la forme :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{u}_k \tau_{ij}) - \tau_{ik} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u'_i u'_j u'_k} + p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{u'_i p'} - \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{u'_j p'} - 2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}\end{aligned}$$

Deardorff [29] propose les modèles suivants pour chaque terme de l'équation :

- Terme de corrélation pression-déformation :

$$p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) = -C_m \frac{\sqrt{q_{sm}^2}}{\Delta} \left(\tau_{ij} - \frac{2}{3} q_{sm}^2 \delta_{ij} \right) + \frac{2}{5} q_{sm}^2 \overline{S}_{ij}$$

où C_m est une constante, q_{sm}^2 l'énergie cinétique sous-maille et \overline{S}_{ij} le tenseur des taux de déformations du champ résolu.

- Terme de dissipation

$$\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} = \delta_{ij} C_e \frac{(q_{sm}^2)^{3/2}}{\Delta}$$

où C_e est une constante.

- Corrélations triples

$$\overline{u'_i u'_j u'_k} = -C_{3m} \overline{\Delta} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \tau_{jk} + \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ik} + \frac{\partial}{\partial x_k} \tau_{ij} \right)$$

Les termes de corrélation pression-vitesse $\overline{p' u'_i}$ sont négligés et les valeurs des constantes sont déterminées dans le cas d'une THI ($C_m = 4.13$, $C_e = 0.70$, $C_{3m} = 0.2$).

13.2.3 Modèles déterministes des structures sous-maille

D'après Misra et Pullin [100], ces modèles reposent sur l'hypothèse que les modes sous-maille peuvent être représentés par des tourbillons étirés dont l'orientation est gouvernée par les échelles résolues.

On suppose que les modes sous-maille peuvent être assimilés à une superposition aléatoire de champs générés par des tourbillons axisymétriques. Voir le livre de Sagaut [122] pour une description plus approfondie de ces modèles.

13.2.4 Modèles basés sur l'hypothèse de similarité d'échelles

L'hypothèse de base de similarité d'échelles proposée par Bardina [7, 8] consiste à supposer que la structure statistique des tenseurs construits à partir des échelles sous-maille est similaire à celle des tenseurs construits à partir des plus petites échelles résolues. Comme le montre la figure 13.2, le spectre est divisé en trois bandes :

- Les plus grandes échelles résolues
- Les plus petites échelles résolues (appelées aussi le champ d'épreuve)
- Les échelles non-résolues

Cette hypothèse de base peut se justifier comme suit. Elle dérive de la notion même de cascade d'énergie. En effet, les échelles non résolues et les plus petites échelles résolues ont un historique commun associé à leurs interactions avec les plus grandes échelles résolues. En effet, la cascade énergétique impose que les plus grandes échelles résolues influencent les plus petites échelles résolues qui influencent à leur tour de façon similaire les échelles sous-maille.

Cette hypothèse a été généralisée par Liu [82] en découpant le spectre en un nombre quelconque de bandes consécutives (voir figure 13.3). L'hypothèse de similarité d'échelles précédemment formulée est alors appliquée pour deux bandes spectrales consécutives.

Tous les modèles de similarité d'échelles font appel à une extrapolation en fréquence, c'est-à-dire que le tenseur sous-maille est approché par un tenseur analogue calculé à partir

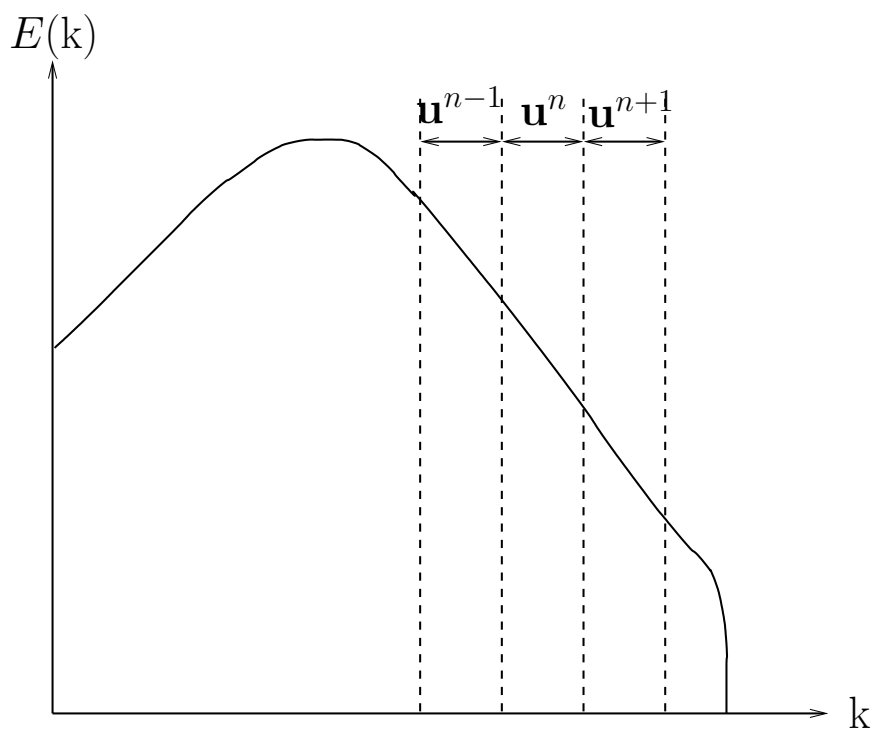


FIGURE 13.3 – Extension de l’hypothèse de similarité d’échelles par Liu [82]. D’après Sagaut [122]

des plus hautes fréquences résolues. Dans le modèle de Bardina [8], le tenseur sous-maille est évalué en appliquant une seconde fois le filtre analytique et ainsi la fluctuation des échelles résolues est estimée. Ce modèle repose sur la décomposition de Léonard [73] :

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j} = C_{ij} + R_{ij} + L_{ij}$$

où $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur sous-maille, \mathbf{C} le tenseur des tensions croisées qui représente les interactions entre les échelles résolues et les échelles sous-maille, \mathbf{R} le tenseur de Reynolds sous-maille qui prend en compte les interactions entre échelles sous-maille et \mathbf{L} le tenseur de Leonard qui représente les interactions entre les grandes échelles.

$$\begin{aligned} C_{ij} &= \overline{u_i u'_j} + \overline{u_j u'_i} \\ R_{ij} &= \overline{u'_i u'_j} \\ L_{ij} &= \overline{\overline{u_i} \overline{u_j}} - \overline{u_i} \overline{u_j} \end{aligned}$$

L'idée est d'appliquer une seconde fois le filtre. Le filtre ne doit donc pas être un opérateur de Reynolds, sinon le filtrage de la contribution sous-maille est nul. L'approximation suivante est également utilisée : $\overline{ab} \approx \overline{a} \overline{b}$. On peut alors écrire :

$$\begin{aligned} R_{ij} &= (\overline{u_i} - \overline{\overline{u_i}})(\overline{u_j} - \overline{\overline{u_j}}) \\ C_{ij} &= (\overline{u_i} - \overline{\overline{u_i}})\overline{u_j} + (\overline{u_j} - \overline{\overline{u_j}})\overline{u_i} \end{aligned}$$

et alors :

$$R_{ij} + C_{ij} = \overline{u_i} \overline{u_j} - \overline{\overline{u_i} \overline{u_j}}$$

Finalement, comme \mathbf{L} s'exprime directement en fonction des échelles résolues, on a pour $\boldsymbol{\tau}$:

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{\overline{u_i} \overline{u_j}}$$

Le modèle de Bardina fait appel à une seconde application du même filtre et donc ne fait intervenir qu'une seule échelle de coupure. Le modèle de Liu-Meneveau-Katz [82] généralise le modèle de Bardina dans le cas où deux niveaux de coupure sont utilisés (filtrage se séparation des échelles noté $\overline{\cdot}$ et filtrage test noté $\widetilde{\cdot}$). On a alors :

$$\tau_{ij} = C_l \left(\overline{\widetilde{u_i} \widetilde{u_j}} - \widetilde{\overline{u_i} \overline{u_j}} \right)$$

avec C_l une constante à évaluer.

13.3 Modélisation mixte

Les modèles fonctionnels prennent correctement en compte les transferts énergétiques entre les échelles résolues et sous-maille. En revanche, la structure, c'est-à-dire les vecteurs propres du tenseur sous-maille, est mal prédite par la modélisation fonctionnelle. Les modèles issus de l'hypothèse de Bardina prédisent mieux la structure du tenseur sous-maille. Ils sont également capables de rendre compte de la cascade inverse. En revanche, les transferts énergétiques inter-échelles sont moins bien représentés par ces modèles. L'idée est alors de combiner un modèle de viscosité sous-maille avec un modèle de similarité d'échelles.

A titre d'exemple, on peut citer le modèle mixte Smagorinski-Bardina [8] qui est une combinaison linéaire du modèle de Smagorinski et du modèle de similarité d'échelles. On a alors :

$$\tau_{ij} = \frac{1}{3}\tau_{kk}\delta_{ij} = \frac{1}{2} \left(-2\nu_{sm}\overline{S}_{ij} + L_{ij} - \frac{1}{3}L_{kk}\delta_{ij} \right)$$

avec

$$\begin{cases} L_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j} \\ \nu_{sm} = C_s \overline{\Delta}^2 |\overline{S}| \end{cases}$$

13.4 Modélisation des tenseurs τ_k et τ_ϕ

Avant toute chose, on rappelle le jeu d'équations LES utilisé :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\theta_k \overline{\rho_k}^\phi \widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\theta_k \overline{\rho_k}^\phi \widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi) + \nabla \cdot (\theta_k \overline{\rho_k}^\phi \widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi \otimes \widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi) - \nabla \cdot \tau_k - \nabla \cdot (\theta_k \overline{\mathbf{T}}_k^\phi) &= - \left[(\overline{\mathbf{T}}_k)_s \cdot \overline{(\mathbf{e}_{n,k}^I)_s} - \lambda_k \right] \frac{\theta_k A_k}{V_k} \\ \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial t} + \overline{\mathbf{u}} \cdot \nabla \overline{\phi} &= -\tau_\phi \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{cases} \tau_k = \theta_k \overline{\rho_k}^\phi \widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi \otimes \widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi - \overline{\theta_k \rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k}^\phi \\ \tau_\phi = \overline{(\mathbf{u} \cdot \nabla) \phi} - (\overline{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \overline{\phi} \end{cases}$$

On s'intéresse ici à la modélisation des deux termes τ_k et τ_ϕ .

Modélisation de τ_k

Pour modéliser τ_k , on utilise un modèle de similarité d'échelles de Bardina. On travaille en incompressible et donc la masse volumique ρ_k est constante par phase k . Ainsi le terme τ_k peut se réécrire ainsi :

$$\tau_k = \theta_k \overline{\rho_k}^\phi \left(\widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi \otimes \widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi - \overline{\mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k}^\phi \right)$$

En s'appuyant sur le modèle de Bardina, on propose comme modèle τ_k^{mod} pour τ_k :

$$\tau_k^{mod} = \theta_k \overline{\rho_k}^\phi \left(\overline{\widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi \otimes \widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi} - \overline{\widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi} \otimes \overline{\widetilde{\mathbf{u}}_k^\phi} \right)$$

Modélisation de τ_ϕ

Pour la modélisation de τ_ϕ , on utilise encore une hypothèse de similarité d'échelles. Le terme τ_ϕ peut se décomposer ainsi :

$$\tau_\phi = R_\phi + C_\phi + L_\phi$$

avec

$$\begin{cases} R_\phi = \overline{(\mathbf{u}' \cdot \nabla) \phi'} \\ C_\phi = \overline{(\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \phi'} + \overline{(\mathbf{u}' \cdot \nabla) \bar{\phi}} \\ L_\phi = \overline{(\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\phi}} - (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\phi} \end{cases}$$

Comme dans le modèle de Bardina, l'idée est d'appliquer un second filtrage pour les termes R_ϕ et C_ϕ . On fait de plus l'hypothèse que :

$$\overline{(\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla) \boldsymbol{\beta}} = (\bar{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \nabla) \bar{\boldsymbol{\beta}}$$

On obtient alors :

$$\begin{cases} R_\phi^{mod} = [(\bar{\mathbf{u}} - \bar{\bar{\mathbf{u}}}) \cdot \nabla] (\bar{\phi} - \bar{\bar{\phi}}) \\ C_\phi^{mod} = (\bar{\bar{\mathbf{u}}} \cdot \nabla) (\bar{\phi} - \bar{\bar{\phi}}) + [(\bar{\mathbf{u}} - \bar{\bar{\mathbf{u}}}) \cdot \nabla] \bar{\bar{\phi}} \end{cases}$$

Après quelques calculs, on montre que

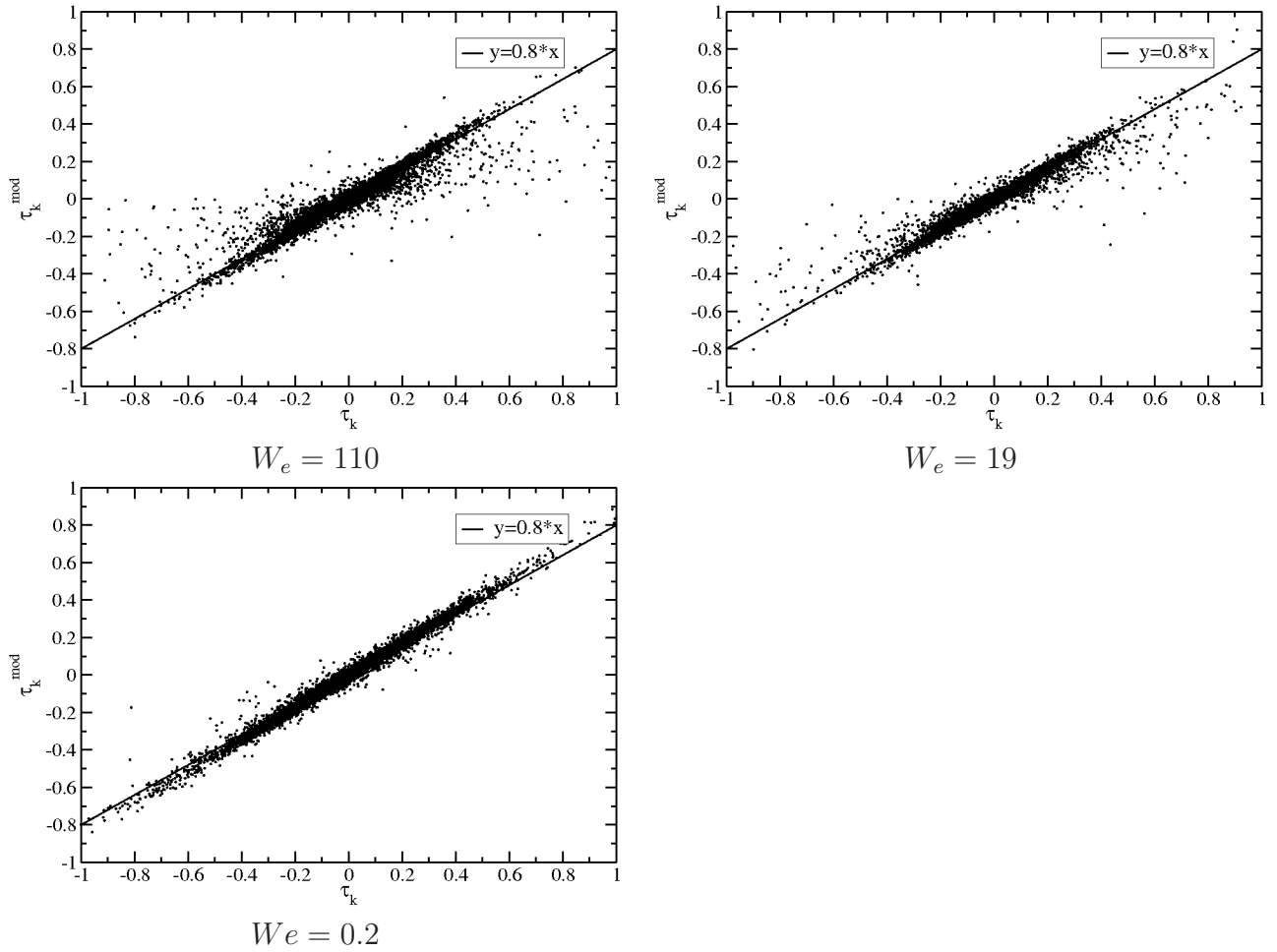
$$R_\phi^{mod} + C_\phi^{mod} = (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\phi} - (\bar{\bar{\mathbf{u}}} \cdot \nabla) \bar{\bar{\phi}}.$$

Si on pose $\tau_\phi^{mod} = R_\phi^{mod} + C_\phi^{mod} + L_\phi$, alors :

$$\boxed{\tau_\phi^{mod} = \overline{(\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\phi}} - (\bar{\bar{\mathbf{u}}} \cdot \nabla) \bar{\bar{\phi}}}$$

Résultats

A partir des DNS précédemment présentées et de l'analyse *a priori*, on peut évaluer la qualité des modèles τ_k^{mod} et τ_ϕ^{mod} . La figure 13.4 représente la norme de $\tau_k^{mod}(\mathbf{x})$ en fonction de la norme de $\tau_k(\mathbf{x})$ pour tout \mathbf{x} dans le domaine de calcul. Chaque point du graphique correspond à un point du domaine de calcul. Le modèle parfait correspondrait à la droite $y = x$. Sur la figure 13.4, les points se répartissent le long d'une droite d'équation $y = 0.8x$ avec une dispersion qui augmente avec le W_e . En effet, le modèle de similarité d'échelles est à la base un modèle établi en monophasique. Pour les grands nombres de Weber (ici $W_e = 110$), le volume du domaine de calcul concerné par un milieu diphasique (c'est-à-dire un volume où les phases sont en présence) est plus important que pour les faibles nombres de Weber (voir d'ailleurs la figure 9.2 page 157). En effet, pour les grands nombre de Weber, le faible coefficient de tension de surface autorise l'interface à se déformer largement, créant ainsi des filaments qui se déchirent à leur tour pour donner une multitude de gouttes, ce qui précise le caractère diphasique du mélange. Ainsi, la grande dispersion du modèle observé pour les grands W_e sur la figure 13.4 est dû à l'aspect diphasique qui n'est pas pris en compte par le modèle de Bardina qu'on utilise. Sur la figure 13.5, on a représenté l'erreur en norme L^1 entre le tenseur sous-maille τ_k et son modèle τ_k^{mod} en fonction de ϕ/δ , la distance normalisée à l'interface. La comparaison est faite pour différents W_e à $t/T_e = 13$. Pour tous les nombres de W_e , le modèle est d'autant moins bon qu'on s'approche de l'interface. Pour tous les nombres de W_e , le modèle est de très bonne qualité pour $\phi/\delta \geq 0.6$. Pour $W_e = 0.2$ et $W_e = 2$, le modèle est très mauvais proche de l'interface. Le modèle de Bardina ne semble pas capable de capter l'action des ondes de surface pour le cas $W_e = 0.2$ ni le couplage fort entre la turbulence et l'interface pour $W_e = 2$.

FIGURE 13.4 – τ_k^{mod} en fonction de τ_k pour différents We à $t/T_e = 13$.

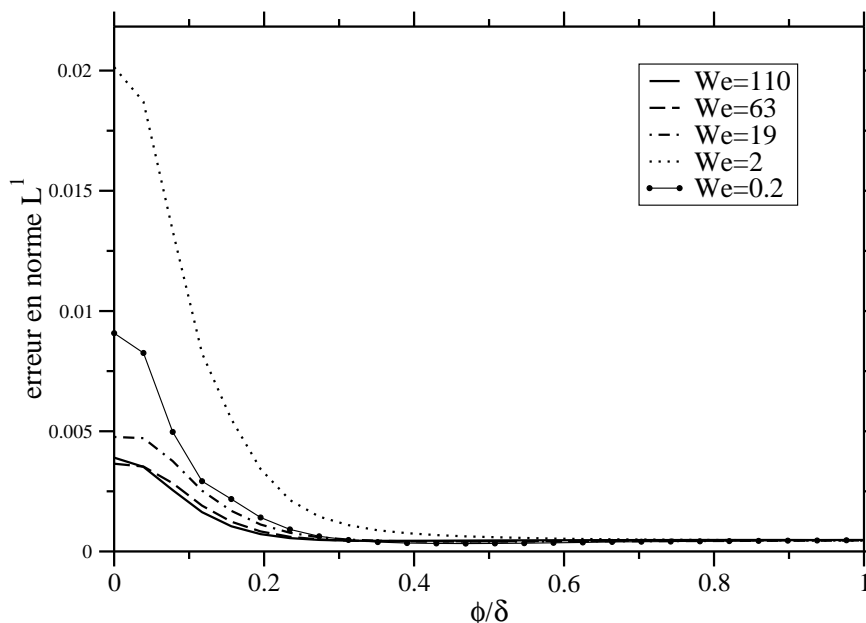
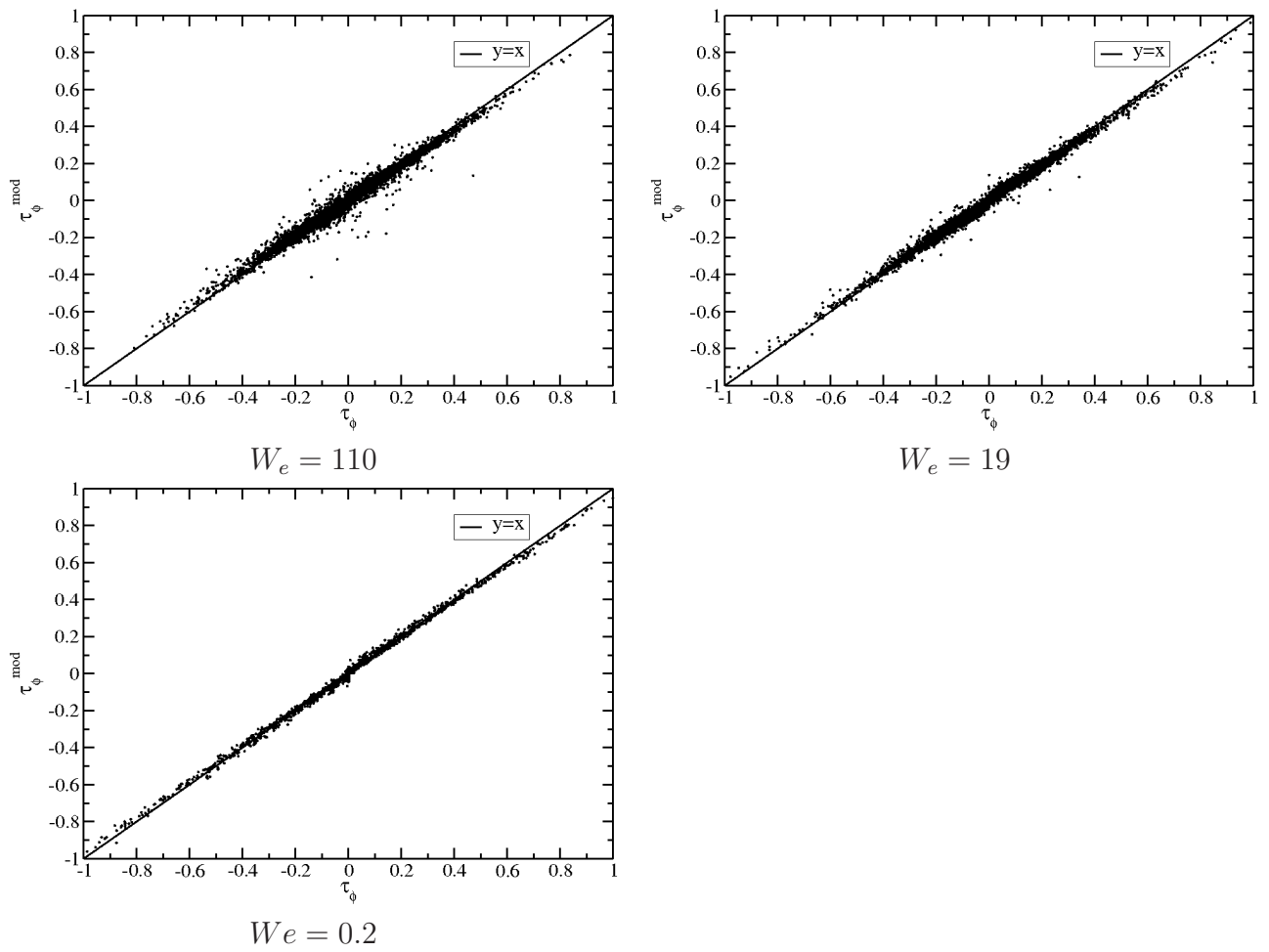


FIGURE 13.5 – Norme L^1 de l'erreur entre τ_k^{mod} et τ_k en fonction de ϕ/δ pour différents W_e à $t/T_e = 13$.

Sur la figure 13.6, on a représenté $\tau_\phi^{mod}(\mathbf{x})$ en fonction de $\tau_\phi(\mathbf{x})$ pour chaque point \mathbf{x} du domaine de calcul. La comparaison est effectuée pour différents W_e et à $t/T_e = 13$. La dispersion est beaucoup moins importante que pour la modélisation de τ_k , et les points s'alignent sur une droite d'équation $y = x$. Encore une fois, le modèle est d'autant meilleur que le W_e est faible. L'hypothèse de similarité d'échelles dans le modèle de Bardina amène à formuler un modèle τ_ϕ^{mod} très bien corrélé avec τ_ϕ .

13.5 Conclusion

L'analyse *a priori* des D.N.S. a été menée, et un filtrage conditionné par la phase a été retenu. Il en dérive la contribution sous-maille du terme classique non linéaire et des termes de couplage inter-phase. Les termes sous-maille inter-phase sont pilotés par la contribution sous-maille du vecteur normal à l'interface. Ainsi, à grands W_e , les fortes déformations inter-faciales induisent des contributions sous-maille importantes du vecteur normal à l'interface. Les termes sous-maille liés au couplage inter-phases sont négligeables aux faibles Weber, là où l'interface n'est perturbée que par des ondes de surface. Un modèle L.E.S. de similarité d'échelles de type Bardina a été implémenté pour modéliser les tenseurs τ_k et τ_ϕ . Les corrélations sont bonnes, sauf au voisinage immédiat de l'interface, où les modèles ne parviennent pas à prendre en compte l'anisotropie du champ de vitesses induite par la proximité de l'interface.

FIGURE 13.6 – τ_ϕ^{mod} en fonction de τ_ϕ pour différents We à $t/T_e = 13$.

Conclusion

Le développement des modèles L.E.S. pour les écoulements incompressibles, turbulents, diphasiques avec interface repose sur une analyse en trois temps. Tout d'abord, les outils et méthodes numériques sont spécifiques aux configurations retenues. L'atomisation étant pour nous le contexte d'étude, les méthodes numériques employées doivent être à même de décrire la physique de tels écoulements. Ensuite, les calculs D.N.S. permettent d'établir une base de données à partir de laquelle des mesures statistiques peuvent être menées. Cette base de D.N.S. nous a permis d'appréhender le couplage interface/turbulence aux plus petites échelles (largement sous-maille pour un calcul L.E.S. par exemple). Bien que conscients que l'utilisation systématique de la D.N.S. n'est pas encore à l'ordre du jour, son utilisation était la seule voie d'approche dans notre étude académique. Enfin, le troisième temps qui mène aux modèles L.E.S. est l'analyse *a priori* de cette base D.N.S. et la mise en lumière des différents termes sous-maille qui dérivent du filtrage des champs issus de la D.N.S. Cette approche en trois temps a motivé la rédaction de ce mémoire en trois parties. La conclusion est ainsi elle-même divisée en trois parties.

Dans une première partie, différentes techniques numériques de résolution des équations de Navier-Stokes ont été comparées. Le contexte de travail étant l'atomisation, les méthodes doivent rendre compte d'une interface largement déformée qui présente de fortes courbures locales. Ainsi, naturellement, les efforts se sont portés sur les méthodes numériques de transport de l'interface et sur le traitement des conditions de saut à l'interface. Pour ce qui est de l'advection de l'interface, des méthodes de front-capturing (level-set, VOF) et de front-tracking (méthodes de marqueurs) ont été présentés. Une méthode hybride combinant un level-set avec des particules représentant l'interface a été présentée également. Pour ce qui est de l'équation d'advection de l'interface, plusieurs techniques existent. Par exemple, pour la technique VOF-PLIC, la fonction couleur est reconstruite géométriquement, alors que pour la technique VOF-TVD, l'équation hyperbolique d'advection est directement résolue, sans reconstruction. Pour les méthodes level-set, il s'est avéré que la technique de discrétisation spatiale de l'équation d'advection de ϕ (équation hyperbolique) est déterminante quant à la qualité de l'advection de l'interface. Pour le traitement des sauts à l'interface, deux grandes techniques ont été présentées : la méthode de régularisation de la tension de surface ou méthode CSF, et la méthode ghost-fluid qui prend en compte les sauts à l'interface directement dans la discrétisation numérique de l'équation de Poisson. Les cas tests utilisés pour tester les différentes méthodes numériques doivent satisfaire à différents critères permettant de valider leurs qualités dans des configurations raides rencontrées dans les processus d'atomisation. A savoir : écoulement turbulent, fortes déformations de l'interface (étirement, formation de ligaments, rupture), fortes courbures locales, forts sauts de masse volumique et de viscosité à l'interface, forte tension de surface. Les cas tests doivent être les plus

Conclusion

défavorables possibles pour éprouver les différentes techniques. Les méthodes level-set pour lesquelles un schéma WENO est utilisé pour la discrétisation spatiale sont très dissipatives, notamment dans les zones de fortes courbures. Le recours à une formulation conservative ainsi qu'une pondération optimale des poids WENO permet d'améliorer la dissipation. Les méthodes VOF, quant à elles, conservent intrinsèquement la masse, mais ont tendance à diffuser (TVD) ou disperser (PLIC) l'interface. Ceci est un handicap pour les zones sous-résolues (queue et tête du serpentin) ou présentant de fortes variations de courbures (coins dans le disque de Zalesak). Pour les méthodes level-set, lorsque la discrétisation spatiale se fait via un schéma spectral, la précision est grande, mais il subsiste un problème de stabilité (surtout aux ordres élevés). Il faut alors limiter la solution, ce qui fait évidemment chuter l'ordre de la méthode. Ce qui semble être le meilleur compromis reste l'utilisation de particules pour décrire l'interface. Ainsi, les sous-résolutions locales sont automatiquement prises en compte par une sur-résolution intrinsèque de ces méthodes avec particules. Lorsque les particules sont connectées entre elles, le calcul de la courbure est alors connu avec précision exactement sur l'interface.

Les techniques de suivi d'interface sont plus ou moins bien adaptées aux deux techniques de prise en compte des sauts à l'interface proposées (CSF et ghost-fluid). La méthode ghost-fluid est très précise lorsqu'elle est couplée à une technique level-set de front-capturing. Mais cette méthode reste limitée car elle nécessite une extrapolation des sauts calculés sur le maillage eulérien vers l'interface. C'est pourquoi l'utilisation de marqueurs qui calculent directement la courbure sur l'interface (et ainsi directement le saut lié à la courbure) améliore grandement les résultats lorsque ces marqueurs sont couplés à une méthode ghost-fluid/level-set (voir par exemple les excellents résultats obtenus pour le traitement des courants parasites). La méthode CSF couplée à une approche VOF de l'interface donne de meilleurs résultats avec VOF-TVD qu'avec VOF-PLIC. En effet, la méthode CSF régularise le saut sur quelques mailles, ce qui est consistant avec la vision VOF-TVD des interfaces. La méthode de front-tracking de Shin et Juric est très précise, mais reste contraignante car elle nécessite d'avoir une interface fermée.

De toutes les méthodes testées, celle retenue est une méthode level-set pour le transport de l'interface. La discrétisation du terme spatial se fait à l'aide de WENO. Les sauts à l'interface sont traités via la méthode ghost-fluid. Cette configuration a été retenue pour l'élaboration de la base D.N.S. Ce n'est pas peut-être pas la meilleure sur la plan de la précision et du taux de convergence, mais en plus d'être suffisamment précise, elle est rapide, ce qui est indispensable pour la réalisation de D.N.S. 512³.

La deuxième partie de ce mémoire est consacrée à l'étude de l'interaction interface/turbulence grâce à des D.N.S. hautement résolues. Le développement de modèles L.E.S. diphasique repose sur la compréhension fine de ces interactions. Tout d'abord, un champ monophasique de THI a été généré puis calibré. Il a été démontré qu'avec une résolution spatiale de 512³ et une discrétisation WENO au 5^{ème} ordre des termes non linéaires, la précision de nos D.N.S. est spectrale. Les évolutions des grandeurs caractéristiques de la turbulence (énergie cinétique turbulence, taux de dissipation visqueuse, échelles de Taylor et de Kolmogorov, etc) sont en accord avec la théorie et avec une simulation réalisée avec un code spectral. Ainsi le champ turbulent est bien calibré et peut servir de condition initiale pour une étude diphasique. Puis une interface est ajoutée au milieu du domaine. La particularité de l'étude consiste à avoir des sauts de masse volumique et de viscosité égaux à 1. Une étude paramétrique en fonction du coefficient de tension de surface σ est alors menée. D'un point de vue qualitatif, deux

types d'interactions interface/turbulence ont été distinguées avec une zone de transition. Pour les grands nombres de Weber, l'interface se déchire sous l'effet des forces de tension de surface et se fragmente en un grand nombre de gouttelettes. L'énergie cinétique turbulente est alors utilisée pour la coalescence des gouttelettes qui forment de plus grosses gouttes. Une zone d'anisotropie et de production de vorticit  se d veloppe au voisinage de l'interface. Un transfert d' nergie s'op re des plus grandes  chelles vers les petites  chelles de la turbulence. Ce transfert est localis  autour de l'interface et les  chelles caract ristiques de ce dernier sont li es   la taille des gouttelettes qui composent en grand nombre le milieu diphasique largement divis . Lorsqu'on diminue le nombre de Weber, une zone de transition (en terme de Weber) est observ e. Les gouttes sont beaucoup plus grosses et n'interagissent pas entre elles. A des temps suffisamment longs, l'interface transmet alors de l' nergie en retour au fluide. Pour des nombres de Weber encore plus faibles, l'interface reste quasi plane et est parcourue par des ondes de surface dont la fr quence appara t dans le bilan de puissance. Le travail effectu  dans cette partie est le premier qui r alise une DNS d'un  coulement pleinement turbulent dans lequel  volue une interface qui se d forme largement. Notre travail sur la compr hension des interactions interface/turbulence est une premi re contribution. En effet, les grands principes de l'interaction interface/turbulence ont  t  d gag s : trois plages de Weber (forts Weber avec fortes d formations de l'interface, faibles Weber avec ondes de surface qui se d veloppent sur l'interface, Weber de transition), zone d'anisotropie et de production de vorticit  autour de l'interface, transfert d' nergie des grandes  chelles vers les petites  chelles. L' tude est limit e   des rapports de ρ et μ  gaux   1. Les prochains travaux devront inclure des sauts de masse volumiques et de viscosit  pour confirmer les r sultats de ce m moire.

La troisi me et derni re partie de ce m moire est d di e   l'analyse *a priori* de la base DNS. Pour l' quation de conservation de la masse et de la quantit  de mouvement, un filtrage conditionn  par la phase a  t  utilis . Ceci pour  viter de filtrer   travers l'interface qui repr sente une discontinuit  pour le tenseur des contraintes. Pour l' quation d'advection de la level-set, un filtrage volumique classique a  t  utilis , la fonction level-set  tant parfaitement continue   travers l'interface. Loin de l'interface, on retrouve les r sultats classiques des  coulements monophasiques et l'int r t est port  au voisinage de l'interface. Les termes sous-mailles principaux sont : celui qui d rive du terme non lin aire (terme classique qu'on retrouve en monophasique), et ceux qui d rivent du couplage entre les deux phases. Ces derniers termes sous-mailles ne peuvent pas  tre n glig s. Au contraire, ils sont m me pr dominants lorsque l'interface pr sente de fortes d formations. En effet, c'est la contribution sous-maille du vecteur normal   l'interface qui pilote l'amplitude des termes sous-maille li s au couplage inter-phase. Plus l'interface est perturb e, plus la contribution sous-maille du vecteur normal est forte. Un mod le de similarit  d' chelles a  t  utilis  pour mod liser les tenseurs sous-maille d rivant des termes non lin aires des  quations de conservation de la quantit  de mouvement et d'advection de la fonction level-set. La corr lation des mod les est bonne, sauf toutefois au voisinage de l'interface o  les mod les n'incorporent pas l'anisotropie qui se d veloppe dans le proche voisinage de l'interface.

Les perspectives pour poursuivre ce travail doivent suivre trois axes. Tout d'abord, continuer   d velopper les m thodes num riques pour am liorer la pr cision et la vitesse des solutions DNS. A sujet, les m thodes hybrides level-set/VOF/particules pour le transport de l'interface sont prometteuses car elles cumulent les avantages de chacune des grandes approches. Parall lement, les DNS doivent  tre poursuivies. Les capacit s grandissantes des

Conclusion

moyens de calcul vont bientôt permettre la montée en Reynolds et ainsi permettre la simulation d'écoulements plus réalistes. Pour ce qui est de l'interaction interface/turbulence, les rapports de densité et de viscosité doivent être augmentés. Enfin, pour ce qui est de la modélisation LES, beaucoup de choses restent à faire. L'analyse *a priori* devra permettre d'augmenter nos connaissances à ce sujet. Un des grands problèmes reste le filtrage des équations diphasiques lorsqu'une méthode raide (comme la ghost-fluid) est utilisée pour représenter les sauts à l'interface. Le filtrage volumique n'est plus alors valide, à moins d'incorporer la contribution du saut dans la modélisation sous-maille, ce que ne préconise pas Sagaut [123]. La solution est alors peut-être de garder une résolution DNS proche de l'interface avec un maillage adaptatif raffiné proche de l'interface. C'est ce que propose Herrmann [50] qui réalise une LES tout en gardant une résolution DNS à l'interface. Le champ DNS à l'interface est alors filtré pour obtenir la contribution des grandes échelles. La problème de la reconstruction du champ de vitesses DNS au voisinage de l'interface se pose alors.

Annexe A

Transformée de Fourier rapide ou FFT

Dans cette annexe, nous nous proposons d'exposer en détail la FFT. En effet, nous avons recodé notre propre transformée de Fourier rapide 3D. Les raisons sont les suivantes :

- Notre code est utilisé sur plusieurs architectures où les bibliothèques de FFT ne sont pas toutes les mêmes (donc besoin de faire des versions différentes d'appels aux routines FFT selon la machine utilisée)
- Pour la parallélisation de la FFT, il s'est avéré plus pratique d'avoir notre propre FFT 3D séquentielle. La parallélisation a alors été naturelle et n'a consisté qu'à un échange MPI entre les processeurs. En effet, lors du codage de notre FFT 3D séquentielle, les notations ont été choisies dans l'optique d'une parallélisation future plus pratique.

Au final, après avoir testé notre FFT, la précision équivaut aux bibliothèques FFTW ou FFTE à la précision machine près. Petit bémol sur la rapidité. On n'obtient pas la rapidité des bibliothèques commerciales (sur la FFT 3D parallélisée par exemple). Cependant, l'écart est négligeable par rapport au gain obtenu entre notre version séquentielle de la FFT 3D et la version parallèle. Pour une résolution de 512^3 , notre FFT 3D parallélisée offrait des performances acceptables. Mais il est évident que des progrès peuvent encore être largement faits sur la rapidité de nos FFT.

A.1 Intérêt de la FFT

On considère un champ f tridimensionnel et spatialement périodique modulo L . Alors, ce champ peut être décomposé de la façon suivante :

$$\hat{f}(\mathbf{x}, t) = \sum_{k_j=-\infty}^{k_j=+\infty} f(\mathbf{k}, t) e^{ik_j x_j}$$

avec $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ et $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$. La fonction \hat{f} est la transformée de Fourier spatiale discrète modulo L de la fonction f . \mathbf{k} est le vecteur d'onde défini par ses composantes :

$$k_j = \frac{2\pi}{L} n_j \quad \text{avec } n_j \in \mathbb{Z}$$

Si le domaine considéré est une boîte cubique de côté L , on peut écrire que :

$$x_j = \frac{L}{N}n_j \quad \text{avec} \quad n_j \in \mathbb{Z}$$

où N est le nombre de points utilisés pour discrétiser le côté de la boîte L . La décomposition en série de Fourier est alors donnée par :

$$\hat{f}(l, m, n) = \sum_{k=-Nz/2}^{Nz/2-1} \sum_{j=-Ny/2}^{Ny/2-1} \sum_{i=-Nx/2}^{Nx/2-1} f(i, j, k) e^{\frac{2i\pi}{Nx}il} e^{\frac{2i\pi}{Ny}jm} e^{\frac{2i\pi}{Nz}kn}$$

avec $(l, m, n) \in [[-Nx/2, Nx/2 - 1]] \times [[-Ny/2, Ny/2 - 1]] \times [[-Nz/2, Nz/2 - 1]]$. On définit alors les indices suivants :

$$ii = \begin{cases} i & \text{si } i \geq 0 \\ i + Nx & \text{si } i < 0 \end{cases}$$

avec une définition analogue pour jj et kk . On peut alors réécrire l'équation précédente ainsi en utilisant la périodicité de la fonction f et les propriétés du cercle trigonométrique :

$$\hat{f}(l, m, n) = \sum_{k=-Nz/2}^{Nz/2-1} \sum_{j=-Ny/2}^{Ny/2-1} \sum_{i=-Nx/2}^{Nx/2-1} f(ii, jj, kk) e^{\frac{2i\pi}{Nx}ii \cdot l} e^{\frac{2i\pi}{Ny}jj \cdot m} e^{\frac{2i\pi}{Nz}kk \cdot n}$$

On peut alors réaliser un changement d'indice et on obtient finalement :

$$\hat{f}(l, m, n) = \sum_{k=0}^{Nz-1} \sum_{j=0}^{Ny-1} \sum_{i=0}^{Nx-1} f(i, j, k) e^{\frac{2i\pi}{Nx}il} e^{\frac{2i\pi}{Ny}jm} e^{\frac{2i\pi}{Nz}kn}$$

avec $(l, m, n) \in [[-Nx/2, Nx/2 - 1]] \times [[-Ny/2, Ny/2 - 1]] \times [[-Nz/2, Nz/2 - 1]]$. Afin que tous les indices évoluent dans les mêmes intervalles, et en utilisant encore une fois les propriétés du cercle trigonométrique, on a finalement :

$$\hat{f}(l, m, n) = \sum_{k=0}^{Nz-1} \sum_{j=0}^{Ny-1} \sum_{i=0}^{Nx-1} f(i, j, k) e^{\frac{2i\pi}{Nx}il} e^{\frac{2i\pi}{Ny}jm} e^{\frac{2i\pi}{Nz}kn}$$

avec $(l, m, n) \in [[0, Nx - 1]] \times [[0, Ny - 1]] \times [[0, Nz - 1]]$. La formulation précédente s'appelle la transformée de Fourier discrète (DFT). En 3D, pour une résolution spatiale de N^3 , la multiplicité de la DFT est en $\mathcal{O}(N^6)$, ce qui correspond au codage naïf de la transformée de Fourier. La DFT devient vite rédhibitoire lorsque N augmente (typiquement, une DFT n'est pas raisonnable pour $N \geq 64$).

C'est pourquoi le recours à la transformée de Fourier (FFT) est indispensable. La multiplicité chute en $\mathcal{O}(N \log N)$ avec une FFT. Nous allons maintenant expliquer le principe de la FFT sur l'exemple 1D.

A.2 Principe de la FFT 1D

La FFT 1D de la fonction f est donnée par :

$$\hat{f}_N(j) = \sum_{i=0}^{N-1} f(i) e^{\frac{2i\pi}{N}ij} \quad \text{avec} \quad j \in [[0, N - 1]]$$

Ici, on a rajouté l'indice N pour signifier que la FFT \hat{f}_N est calculée sur N points. On pose alors $\omega = e^{\frac{2i\pi}{N}}$ et donc :

$$\hat{f}_N(j) = \sum_{i=0}^{N-1} f(i)\omega^{ij} \quad \text{avec } j \in [[0, N-1]]$$

Le calcul repose sur un principe de décimation. La transformée de Fourier de longueur N peut être réécrite comme la somme de deux transformées chacune de longueur $N/2$. Une transformée est constituée des indices pairs et l'autre des indices impairs.

$$\begin{aligned} \hat{f}_N(j) &= \sum_{i=0}^{N-1} f(i)\omega^{ij} \quad \text{avec } j \in [[0, N-1]] \\ &= \sum_{i=0}^{N/2-1} f(2i)\omega^{(2i)j} + \sum_{i=0}^{N/2-1} f(2i+1)\omega^{(2i+1)j} \quad \text{avec } j \in [[0, N-1]] \\ &= \sum_{i=0}^{N/2-1} f(2i)e^{\frac{2i\pi}{N/2}ij} + \omega^j \sum_{i=0}^{N/2-1} f(2i+1)e^{\frac{2i\pi}{N/2}ij} \quad \text{avec } j \in [[0, N-1]] \end{aligned}$$

Si $j \in [[0, N/2-1]]$:

$$\hat{f}_N(j) = \hat{f}_{N/2}^{\text{pair}}(j) + \omega^j \hat{f}_{N/2}^{\text{impair}}(j)$$

Si $j \in [[N/2, N-1]]$ et $jj \equiv j - N/2$:

$$\begin{aligned} \hat{f}_N(j) &= \sum_{i=0}^{N/2-1} f(2i)e^{\frac{2i\pi}{N/2}ij} + \omega^j \sum_{i=0}^{N/2-1} f(2i+1)e^{\frac{2i\pi}{N/2}ij} \quad \text{avec } j \in [[N/2, N-1]] \\ &= \sum_{i=0}^{N/2-1} f(2i)e^{\frac{2i\pi}{N/2}i(jj+N/2)} + \omega^{jj+N/2} \sum_{i=0}^{N/2-1} f(2i+1)e^{\frac{2i\pi}{N/2}i(jj+N/2)} \quad \text{avec } jj \in [[0, N/2-1]] \\ &= \sum_{i=0}^{N/2-1} f(2i)e^{\frac{2i\pi}{N/2}ijj} + \omega^{jj+N/2} \sum_{i=0}^{N/2-1} f(2i+1)e^{\frac{2i\pi}{N/2}ijj} \quad \text{avec } jj \in [[0, N/2-1]] \\ &= \hat{f}_{N/2}^{\text{pair}}(jj) + \omega^{jj+N/2} \hat{f}_{N/2}^{\text{impair}}(jj) \end{aligned}$$

Ainsi, la transformée de Fourier $\hat{f}_N(j)$ fait appel à la somme des deux FFT de taille $N/2$: $\hat{f}_{N/2}^{\text{pair}}$ et $\hat{f}_{N/2}^{\text{impair}}$. Les méthodes de calcul récursives se prêtent très bien au calcul des FFT.

A.3 Extension aux cas 2D et 3D

L'extension aux cas 2D et 3D est immédiate et peut se réduire à une succession de FFT 1D. En effet, dans le cas 3D :

$$\hat{f}(l, m, n) = \sum_{k=0}^{Nz-1} \sum_{j=0}^{Ny-1} \sum_{i=0}^{Nx-1} f(i, j, k) e^{\frac{2i\pi}{Nx}il} e^{\frac{2i\pi}{Ny}jm} e^{\frac{2i\pi}{Nz}kn}$$

La formule peut se réécrire :

$$\hat{f}(l, m, n) = \sum_{k=0}^{Nz-1} \left(\sum_{j=0}^{Ny-1} \left(\sum_{i=0}^{Nx-1} f(i, j, k) e^{\frac{2i\pi}{Nx}il} \right) e^{\frac{2i\pi}{Ny}jm} \right) e^{\frac{2i\pi}{Nz}kn}$$

qui montre bien l'emboîtement qui permet de calculer la FFT 3D à partir seulement de FFT 1D.

Annexe B

Extraction de composantes connexes par arcs

Ici, l'enjeu est de pouvoir isoler les gouttes les unes des autres d'un brouillard pour les caractériser une par une. Dans notre cas, les gouttes sont représentées par une fonction level-set positive alors que l'extérieur par une level-set négative. Sur la figure B.1(a), trois gouttes de liquide ($\phi > 0$) sont représentées dans une phase gazeuse ($\phi < 0$). Le seul trait

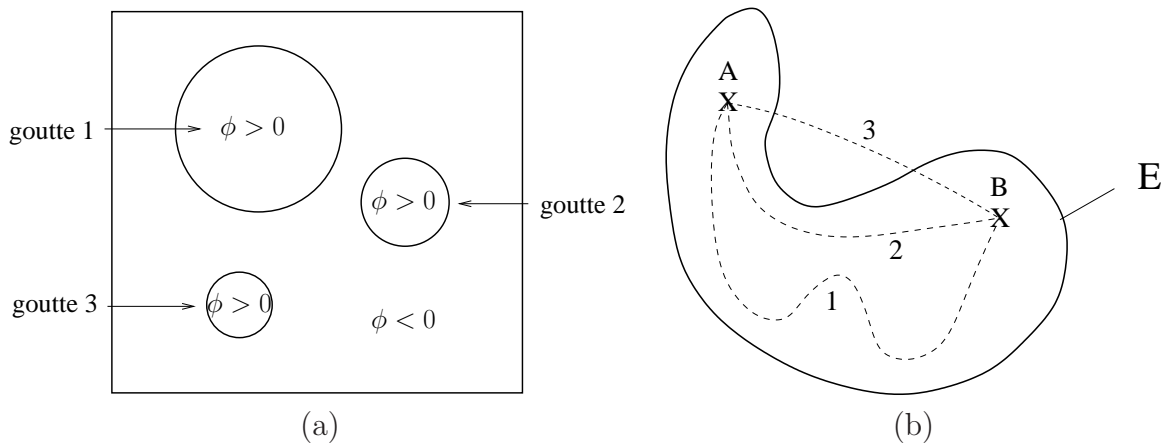


FIGURE B.1 – (a) : représentation de trois gouttes de liquide ($\phi > 0$) dans un gaz ($\phi < 0$). (b) : Les itinéraires 1 et 2 sont des chemins pour relier A à B , mais pas l'itinéraire 3.

commun entre ces trois gouttes est que $\phi > 0$ à l'intérieur des gouttes. La level-set seule ne permet pas d'isoler chacune des gouttes. Isoler chaque goutte revient à déterminer les composantes connexes par arcs caractérisées par $\phi > 0$. Avant toute chose, quelques rappels mathématiques sur la connexité.

B.1 Rappels mathématiques

La connexité par arcs repose sur la notion de chemin qui est défini ainsi :

Définition 1 *Si E est un espace topologique et si x et y sont deux points de E , on appelle*

chemin d'origine x et d'extrémité y toute application continue $\gamma : [0, 1] \rightarrow E$ telle que $\gamma(0) = x$ et $\gamma(1) = y$.

Sur la figure B.1(b), trois itinéraires sont représentés pour relier les points A et B de l'espace E . Seuls les itinéraires 1 et 2 sont des chemins. L'itinéraire 3 n'est pas un chemin car sa "trace" sort de l'espace E .

La définition d'un espace connexe par arcs découle immédiatement de celle d'un chemin :

Définition 2 *Un espace topologique E est dit connexe par arcs si et seulement si tout couple de points de E est relié par un chemin.*

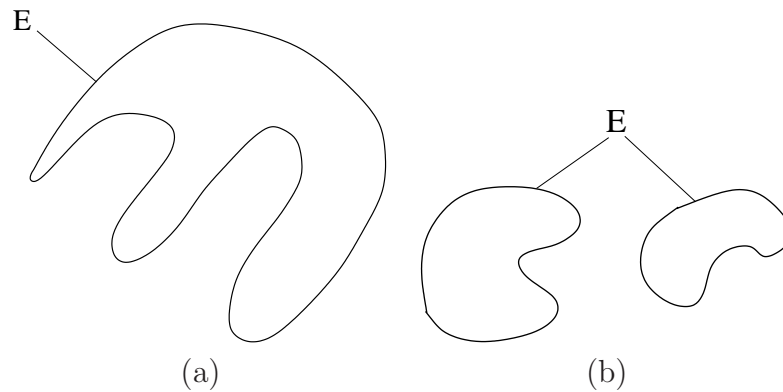


FIGURE B.2 – (a) : l'espace E est connexe par arcs. (b) : l'espace E n'est pas connexe par arcs.

La définition de connexité par arcs peut être généralisée à des parties de l'espace E :

Définition 3 *Une partie A de E est dite connexe par arcs si et seulement si tout couple de points de A est relié par un chemin restant dans A .*

Répérer les gouttes d'un spray revient donc à rechercher les composantes connexes par arcs caractérisées par $\phi > 0$. La technique utilisée est une technique de reconstruction géodésique provenant d'un cours de morphologie mathématique [93].

B.2 Opérations géodésiques

On se propose de définir les opérations géodésiques de base qui permettent d'extraire les composantes connexes par arcs : la dilatation géodésique et la reconstruction géodésique. La topologie sous-jacente à ces opérations est définie par un élément structurant.

B.2.1 Élément structurant

L'élément structurant définit le "voisinage élémentaire" de l'origine. Dans le cas discret, l'élément structurant est en général la boule élémentaire de taille 1, ce qui détermine la topologie utilisée. Les deux principaux éléments structurants utilisés sont présentés sur la figure B.3. Dans nos travaux, nous avons utilisé la boule unité qui comporte 8 voisins autour du point à partir duquel s'effectue la dilatation (élément structurant de droite sur la figure B.3). Nous noterons cette boule unité B^8 par la suite.

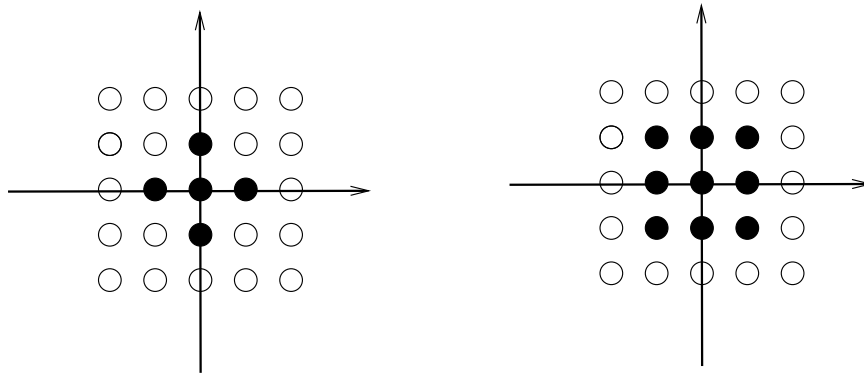


FIGURE B.3 – Deux types d'éléments structurants différents dans le cas discret.

B.2.2 Dilatation géodésique

Si X est un ensemble, la dilatation de X dans l'espace tout entier par la boule B^8 est notée $\delta_{B^8}(X)$. L'ensemble X ainsi que sa dilatation $\delta_{B^8}(X)$ sont représentés sur la figure B.4. Une fois la définition de la dilatation géodésique acquise, la dilatation géodésique dans un

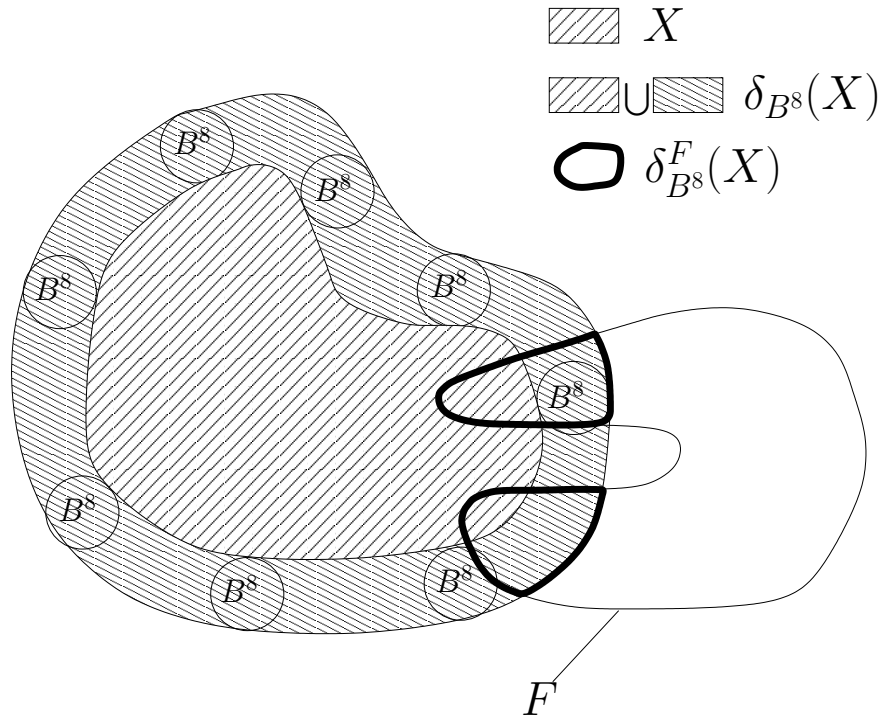


FIGURE B.4 – Dilatation de X par la boule B^8 .

ensemble F (notée $\delta_{B^8}^F(X)$) est définie ainsi :

$$\delta_{B^8}^F(X) = \delta_{B^8}(X) \cap F$$

$\delta_{B^8}^F(X)$ est représentée sur la figure B.4. Ainsi, la dilatation géodésique de X dans F par la boule élémentaire est l'ensemble des voisins de X inclus dans F .

B.2.3 Reconstruction géodésique

On définit la suite d'ensembles suivante :

$$\begin{cases} (\delta_{Bs}^F)^0(X) = X \\ (\delta_{Bs}^F)^{n+1}(X) = \delta_{Bs}^F((\delta_{Bs}^F)^n(X)) \quad \text{pour } n > 0 \end{cases}$$

La reconstruction géodésique de X dans F est alors définie par :

$$E_{Bs}^F(X) = \sup_{n \geq 0} \{(\delta_{Bs}^F)^n(X)\}$$

Pour notre cas d'étude, si X est le domaine de calcul tout entier Ω et F défini ainsi :

$$F = \{\mathbf{x} \in \Omega, \phi(\mathbf{x}) > 0\}$$

alors $E_{Bs}^F(X)$ représente l'ensemble des gouttes de liquide ($\phi > 0$), qui est bien un ensemble de composantes connexes par arcs.

C'est cet algorithme de reconstruction géodésique que nous avons codé pour extraire des gouttes afin de mener une étude statistique sur la taille de ces dernières.

B.3 Algorithme de reconstruction géodésique

Nous nous proposons ici de décrire l'algorithme qui permet de déterminer les composantes connexes par arcs (ici les gouttes). On a eu recours aux listes chaînées (avec des pointeurs) qui sont particulièrement pratiques dans notre cas. L'exposé de l'algorithme s'inspire du formalisme *fortran*.

La première étape est de numériser la configuration. Les cellules pour lesquelles $\phi > 0$ sont affectées d'une "phase numérique" égale à 1. Les autres cellules sont affectées d'une "phase numérique" égale à 0. Chaque goutte est alors constituée de pixels. Le type *Pixel* est défini ainsi :

```
type Pixel
  integer :: x
  integer :: y
  integer :: z
  type(Pixel), pointer :: pixelSuivant
end type Pixel
```

Les attributs x , y et z sont les coordonnées spatiales du pixel. Une goutte est alors définie comme un pointeur de type *Pixel*.

```
type(Pixel), pointer :: goutte_Ptr
```

La liste chaînée qui représente une goutte est représentée sur la figure B.5. Pour représenter le nuage de gouttes, on introduit un nouveau type *Goutte*.

```
type Goutte
  type(Pixel), pointer :: premierPixel
  type(Goutte), pointer :: goutteSuivante
end type Goutte
```

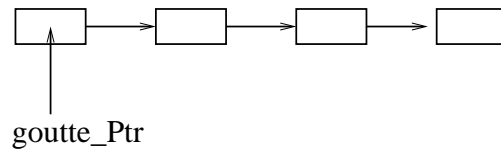


FIGURE B.5 – Une goutte est un pointeur de type *Pixel*. Les pixels pointent les uns vers les autres à la façon d’une liste chaînée.

L’attribut *premierPixel* est le premier pixel de la goutte. L’ensemble des gouttes (des composantes connexes par arcs) est défini ainsi :

```
type(Goutte), pointer :: ensembleGouttes
```

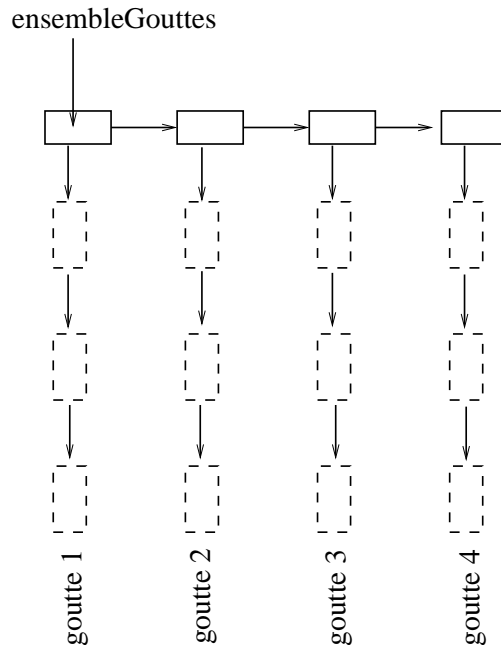


FIGURE B.6 – *ensembleGouttes* est un pointeur de type *Goutte*. Chaque élément de la liste chaînée est lui-même un pointeur de type *Pixel* qui pointe sur le premier pixel de la goutte considérée.

ensembleGouttes est un pointeur de type *Goutte*. C’est en fait une liste chaînée dont chaque élément constitue une goutte. Chacune de ces gouttes est en fait un pointeur qui pointe sur le premier pixel de la goutte en question. Tous les pixels de la goutte sont reliés par une liste chaînée.

L’algorithme de reconstruction géodésique est expliqué sur la figure B.7. Une goutte est représentée par les 7 pixels A,B,C,D,E,F,G. Deux pointeurs sont utilisés : un pointeur *Temporaire* qui stocke les pixels candidats à la formation de la goutte, et un pointeur *Goutte* qui contient les pixels qui la composent. Le pixel de la tête de *Temporaire* est extrait et ajouté en tête de *Goutte*. Les pixels déterminés par l’élément structurant autour du pixel extrait sont ajoutés en tête de *Temporaire* (s’ils sont libres). L’algorithme se termine lorsque

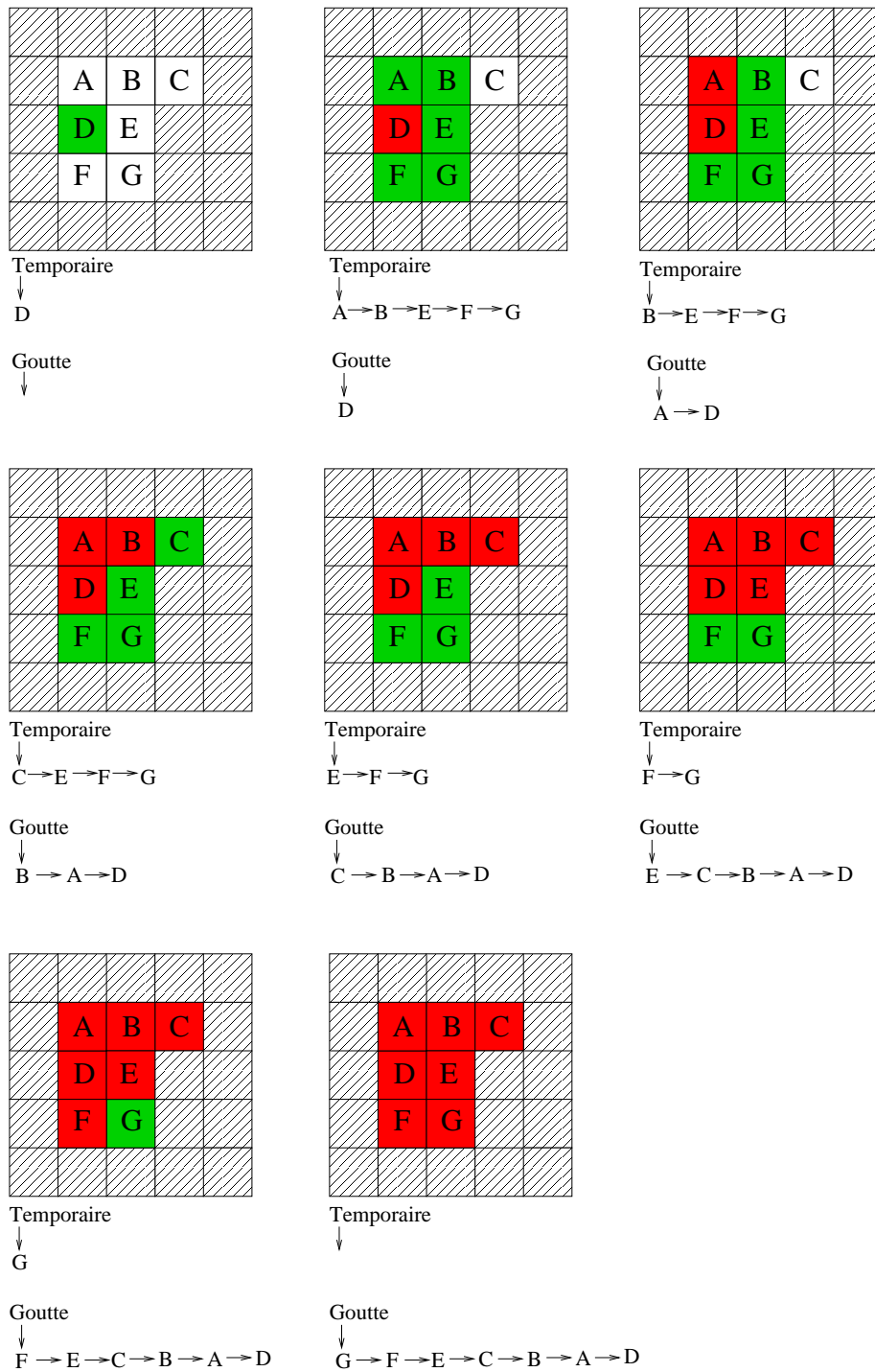


FIGURE B.7 – Algorithme de reconstruction géodésique. Une goutte est constituée des pixels A,B,C,D,E,F,G. Les pixels en rouge sont ceux inclus dans la goutte. Les pixels en vert sont ceux en attente pour une inclusion dans la goutte.

B.3 Algorithme de reconstruction géodésique

le pointeur *Temporaire* est vide. Le pointeur *Goutte* contient alors tous les pixels de la goutte considérée.

Bibliographie

- [1] D. Adelsteinsson and J.A. Sethian. The fast construction of extension velocities in level-set methods. *J. Comput. Phys.*, 148 :2–22, 1999.
- [2] DM. Anderson, GB. McFadden, and AA. Wheeler. Diffuse-interface models in fluids mechanics. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 30 :139–165, 1998.
- [3] V. De Angelis. *Numerical investigation and modeling of mass transfert processes at sheared gas-liquid interface*. PhD thesis, UCSB, 1998.
- [4] P.W. Atkins, L. Jones, and A. Pousse. *Chimie : Molécules, matière, métamorphoses*. De Boeck Université, 1998.
- [5] S. Balachandar and M.R. Maxey. Methods for evaluating fluid velocities in spectral simulations of turbulence. *J. Comput. Phys.*, 83 :96–125, 1989.
- [6] S. Banerjee, D. Lakehal, and M. Fulgosi. Surface divergence models for scalar exchange between turbulent streams. *Int. J. Mult. Flow*, 30 :963–977, 2004.
- [7] J. Bardina, JH Ferziger, and WC Reynolds. Improved subgrid-scale models for large-eddy simulation. In *American Institute of Aeronautics and Astronautics, Fluid and Plasma Dynamics Conference, 13th, Snowmass, Colo., July 14-16, 1980, 10 p.*, 1980.
- [8] J. Bardina, JH Ferziger, and WC Reynolds. Improved turbulence models based on large eddy simulation of homogeneous, incompressible turbulent flows. *Final Report Stanford Univ., CA. Dept. of Mechanical Engineering.*, 1983.
- [9] J.A. Battjes. Surf-zones dynamics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 20 :257–293, 1988.
- [10] R. Bayer. Symmetric binary b-trees : Data structure and maintenance algorithms. *Acta Informatica*, 1 :290–306, 1972.
- [11] J.B. Bell and H.M. Glaz P. Colella. A second-order projection method for the incompressible navier-stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 85 :257–283, 1989.
- [12] GM Bianchi, F. Minelli, R. Scardovelli, and S. Zaleski. 3d large scale simulation of the high-speed liquid jet atomization. 2007.
- [13] G.M. Bianchi, P. Pelloni, S. Toninel, R. Scardovelli, A. Leboissetier, and S. Zaleski. Improving the knowledge of high-speed liquid jets atomization by using quasi-direct 3d simulation. 2005.
- [14] G.D. Birkhoff. Proof of the ergodic theorem. *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.*, 17 :656–660, 1931.
- [15] G.D. Birkhoff and B.O. Koopman. Recent contributions to ergodic theory. *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.*, 18 :278–282, 1932.

BIBLIOGRAPHIE

- [16] H. Boughanem and A. Trouvé. Validation du code de simulation directe 'NTMIX3D' pour le calcul des écoulements turbulents réactifs. Technical Report 42907, Institut Français du Pétrole, April 1996.
- [17] JU. Brackbill, DB. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100 :335–354, 1992.
- [18] B. Bunner and G. Tryggvason. Effect of bubble deformation on the properties of bubbly flows. *J. Fluid Mech.*, 495 :77–118, 2003.
- [19] JP. Caltagirone and J. Breil. Sur une méthode de projection vectorielle pour la résolution des équations de Navier-Stokes. *C. R. Acad. Sci. série II b*, 327 :1179–1184, 1999.
- [20] H. Carentz. *ETUDE DE LA PULVERISATION D'UNE NAPPE LIQUIDE MINCE*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2000.
- [21] MD. Carrara and PE. Desjardin. A filtered mass density function approach for modeling separated two-phase flow for LES I : mathematical formulation. *Int. J. Multiphase Flow*, 32 :365–384, 2006.
- [22] P. Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides. Analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur*. Editions Cépaduès, 2000.
- [23] J. Chesnel, J. Réveillon, T. Ménard, M. Doring, A. Berlemont, and FX. Demoulin. LES of atomization : from the resolved liquid surface to the subgrid scale spray. In *11th Triennial International Annual Conference on Liquid Atomization and Sprays Systems.*, ICLASS 2009, Vail, Colorado, USA, July 2009.
- [24] AJ. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Math. Comp.*, 22 :745–762, 1968.
- [25] AJ. Chorin. Flame advection and propagation algorithms. *J. Comput. Phys.*, 35 :1–11, 1980.
- [26] F. Couderc. *Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux*. PhD thesis, Ecole nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace, 2007.
- [27] J. Cousteix. *Turbulence et couche limite*. Cepadues Toulouse, 1989.
- [28] E. De Villiers, AD Gosman, and HG Weller. Large eddy simulation of primary diesel spray atomization. *SAE transactions*, 113(3) :193–206, 2004.
- [29] JW Deardorff. The use of subgrid transport equations in a three-dimensional model of atmospheric turbulence. In *ASME, Applied Mechanics and Fluids Engineering Conference, Atlanta, USA*, pages 429–438, 1973.
- [30] R. DeBar. A method in two-d Eulerian hydrodynamics. Technical Report UCID-19683, Lawrence Livermore National Laboratory, 1974.
- [31] HA. Van der Vorst. BI-CGSTAB : a fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of non-symmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 13 :631–644, 1992.
- [32] O. Desjardins, V. Moureau, E. Knudsen, M. Herrmann, and H. Pitsch. Conservative level set/ghost fluid method for simulating primary atomization. In *ILASS Americas 20th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, 2007.

-
- [33] O. Desjardins, V. Moureau, and H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227(18) :8395–8416, 2008.
- [34] O. Desjardins and H. Pitsch. A spectrally refined interface approach for simulating multiphase flows. *J. Comput. Phys.*, 228 :1658–1677, 2009.
- [35] D. Enright, R. Fedkiw, J. Ferziger, and I. Mitchell. A hybrid particle level-set method for improved interface capturing. *J. Comput. Phys.*, 183 :83–116, 2002.
- [36] R. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics*, 152 :457–492, 1999.
- [37] R. Fedkiw, T. Aslam, and S. Xu. The ghost fluid method for deflagration and detonation discontinuities. *Journal of Computational Physics*, 154 :393–427, 1999.
- [38] R. Fedkiw and X.D. Liu. The ghost fluid method for viscous flows. In M. Hafez, editor, *Progress in Numerical Solutions of Partial Differential Equations.*, Arcachon, France, 1998.
- [39] M. Fortin and R. Glowinski. *Méthodes de lagrangien augmenté. Application à la résolution numérique de problèmes aux limites.* Dunod, Paris, 1982.
- [40] M. Fulgosi, D. Lakehal, S. Banerjee, and V. DeAngelis. Direct numerical simulation of turbulence in a sheared air-water flow with deformable interface. *J. Fluid. Mech.*, 482 :319–345, 2003.
- [41] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3 :1760–1765, 1991.
- [42] S. Gottlieb and C.W. Shu. Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Mathematics of Computation*, 67(221) :73–85, 1998.
- [43] W. Grey and P. Lee. On the theorems for local volume averaging of multiphase systems. *Int. J. Multiphase Flow*, 3 :333–340, 1976.
- [44] WW Hagerty and JF Shea. A study of the stability of plane fluid sheets. *J. Appl. Mech*, 22(3), 1955.
- [45] F. Ham and Y. Young. A hybrid Eulerian-Lagrangian method for LES of atomising spray. In *2 nd International Conference on Computational Methods in Multiphase Flow; Sante Fe, NM*, pages 313–322. WIT Press, c/o Computational Mechanics Inc, 25 Bridge Street, Billerica, MA, 01821, USA., 2003.
- [46] R.A. Handler, T.F. Swean, R.I. Leighton, and J.D. Swearingen. Length scales and the energy balance for turbulence near a free surface. *AIAA Journal*, 31(11) :1998–2007, 1993.
- [47] FH. Harlow and JE. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, 8 :2182–2189, 1965.
- [48] M. Herrmann. A balanced force refined level-set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *J. Comput. Phys.*, 227 :2674–2706, 2008.
- [49] M. Herrmann. A balanced force refined level-set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *J. Comput. Phys.*, 227 :2674–2706, 2008.

BIBLIOGRAPHIE

- [50] M. Herrmann and M. Gorokhovski. An outline of an LES subgrid model for liquid/gas phase interface dynamics. In *Proceedings of the CTR Summer Program*, page 171, 2008.
- [51] M. Herrmann and M. Gorokhovski. An outline of an LES subgrid model for liquid/gas phase interface dynamics. In *Proceedings of the Summer Program 2008. Center for Turbulence Research.*, 2008.
- [52] S. Hieber and P. Koumoutsakos. A Lagrangian particle level-set method. *J. Comput. Phys.*, 210 :342–367, 2005.
- [53] J.O. Hinze. *Turbulence*. McGraw-Hill, 1975.
- [54] CW. Hirt and BD. Nichols. Volume Of Fluids (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, 39 :201–225, 1981.
- [55] K.Y. Huh, E. Lee, and J.Y. Koo. Diesel spray atomization model considering nozzle exit turbulence conditions. *Atomization and Sprays*, 8(4) :453–470, 1998.
- [56] S.A. Jazayeri and X. Li. Nonlinear instability of plane liquid sheets. *Journal of Fluid Mechanics*, 406 :281–308, 2000.
- [57] D. Juric and G. Tryggvason. Computation of boiling flows. *Int. J. Mult. Flow*, 24 :387–410, 1998.
- [58] M. Kang, R. Fedkiw, and X.D. Liu. A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow. *Journal of Scientific Computing*, 15 :323–360, 2000.
- [59] T. Von Karman and L; Howarth. On the statistical theory of isotropic turbulence. *Göttingen Nachrichte*, A 164(917) :192–215, 1938.
- [60] T. Kawamura and Y. Kodama. Numerical simulation method to resolve interactions between bubbles and turbulence. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 23 :627–638, 2002.
- [61] D. Kim, O. Desjardins, M. Herrmann, and P. Moin. The primary breakup of a round liquid jet by a coaxial flow of gas. In *ILASS Americas 20th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems. ILASS Americas*, 2007.
- [62] ELG Kit, EJ Strang, and HJS Fernando. Measurement of turbulence near shear-free density interfaces. *Journal of Fluid Mechanics*, 334 :293–314, 1997.
- [63] A.N. Kolmogorov. Decay of isotropic turbulence in incompressible viscous fluids. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 31 :538, 1941.
- [64] S. Komori, R. Nagaosa, Y. Murakami, S. Chiba, K. Ishii, and K. Kuwahara. Direct numerical simulation of three-dimensional open-channel flow with zero-shear gas-liquid interface. *Phys. Fluids A*, 5 :115–125, 1993.
- [65] KK. Kuo. *Principles of combustion*. Wiley-Interscience, 1986.
- [66] E. Labourasse, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, S. Vincent, O. Lebaigue, J.P. Caltagirone, and P. Sagaut. Towards Large Eddy Simulation of isothermal two-phase flows : governing equations and a priori tests. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(1) :1–39, 2007.
- [67] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *J. Comput. Phys.*, 113 :134–147, 1994.

-
- [68] D. Lakehal, S. Reboux, and P. Liovic. SGS modelling for the LES of interfacial gas-liquid flows. *La Houille Blanche - Revue Internationale de L'eau*, 6 :125–131, 2005.
- [69] K. Lam and S. Banerjee. Investigation of turbulent flow bounded by a wall and a free surface. In E.E. Michaelides and M.P. Sharma, editors, *Fundamentals of Gas-Liquid Flows*, volume 72, pages 29–38, ASME, New York, 1988.
- [70] K. Lam and S. Banerjee. On the condition of streaks formation in a bounded turbulent flow. *Phys. Fluids A*, 4 :306–320, 1992.
- [71] H. Lamb. *Hydrodynamics*. Dover Publications, 1932.
- [72] JC Lasheras, E. Villermaux, and EJ Hopfinger. Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 357 :351–379, 1998.
- [73] A. Leonard. Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. *Adv. Geophys*, 18 :237–248, 1974.
- [74] S. Leung and H. Zhao. A grid based particle method for moving interface problems. *J. Comput. Phys.*, 228 :2993–3024, 2009.
- [75] RJ. LeVeque and Z. Li. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *SIAM J. Numer. Anal.*, 31 :1019–1044, 1994.
- [76] RJ. LeVeque and Z. Li. Immersed interface method for stokes flow with elastic boundaries or surface tension. *SIAM J. Sci. Comput.*, 18 :709–735, 1997.
- [77] Z. Li, F.A. Jaber, and T.I-P. Shih. A hybrid lagrangian-eulerian particle-level set method for numerical simulations of two-fluid turbulent flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 56 :2271–2300, 2008.
- [78] Z. Li and MC. Lai. The immersed interface method for the Navier-Stokes equations with singular forces. *J. Comput. Phys.*, 171 :822–842, 2001.
- [79] DK Lilly. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4 :633–635, 1992.
- [80] P. Liovic and D. Lakehal. Interface-turbulence interactions in large-scale bubbling processes. *Int. J. Heat and Fluid flow*, 28 :127–144, 2007.
- [81] P. Liovic and D. Lakehal. Multi-physics treatment in the vicinity of arbitrarily deformable gas-liquid interfaces. *J. Comput. Phys.*, 222 :504–535, 2007.
- [82] S. Liu, C. Meneveau, and J. Katz. On the properties of similarity subgrid-scale models as deduced from measurements in a turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics Digital Archive*, 275 :83–119, 2006.
- [83] X.D. Liu, R. Fedkiw, and M. Kang. A boundary condition capturing method for poisson’s equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 160 :151–178, 2000.
- [84] XD. Liu, S. Osher, and T. Chan. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *J. Comput. Phys.*, 115 :200–212, 1994.
- [85] Y. Liu, M. Vinokur, and ZJ. Wang. Spectral difference method for unstructured grids i : Basic formulation. *J. Comput. Phys.*, 216 :780–801, 2006.

BIBLIOGRAPHIE

- [86] P. Lombardi, V. De Angelis, and S. Banerjee. Direct numerical simulation of near-interface turbulence in coupled gas-liquid flow. *Phys. Fluids*, 8 :1643–1665, 1996.
- [87] E.N. Lorenz. Deterministic nonperiodic flow. *J. Atmos. Sci.*, 20 :130–141, 1963.
- [88] A. Lozano, F. Barreras, G. Hauke, and C. Dopazo. Longitudinal instabilities in an air-blasted liquid sheet. *Journal of Fluid Mechanics*, 437 :143–173, 2001.
- [89] J. Magnaudet. High-Reynolds-number turbulence in a shear-free boundary layer : revisiting the Hunt-Graham theory. *J. Fluid Mech.*, 484 :167–196, 2003.
- [90] A. Mansour and N. Chigier. Disintegration of liquid sheets. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 2 :706–719, 1990.
- [91] A. Mansour and N. Chigier. Dynamic behavior of liquid sheets. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3 :2971–2980, 1991.
- [92] N.N. Mansour and A.A. Wray. Decay of isotropic turbulence at low Reynolds number. *Phys. Fluids*, 6(2) :808–814, 1994.
- [93] A. Manzanera. Cours de morphologie mathématique. *UPMC/Master IAD*, 2005.
- [94] P. Marmottant and E. Villermaux. On spray formation. *Journal of Fluid Mechanics*, 498 :73–111, 2004.
- [95] WD McComb. *The physics of fluid turbulence*. Oxford University Press, USA, 1990.
- [96] T. Menard, PA Beau, S. Tanguy, FX Demoulin, and A. Berlemont. Primary break up modeling, part a : Dns, a tool to explore primary break up. *ICLASS-2006, number ICLASS06-034*, 2006.
- [97] T. Ménard, S. Tanguy, and A. Berlemont. Coupling level set/VOF/ghost fluid methods : Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5) :510–524, 2007.
- [98] V. Mihalef, M. Sussman, and D. Metaxas. The marker level-set method : a new approach to computing accurate interfacial dynamics. *Not published*, 2007.
- [99] RR. Mills, ALJ. Kistler, V. O’Brien, and S. Corrsin. Turbulence and temperature fluctuation behind a heated grid. Technical report, N.A.C.A., 1958.
- [100] A. Misra and D.I. Pullin. A vortex-based subgrid stress model for large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 9(8) :2443–2454, 1997.
- [101] P. Moin and K. Mahesh. Direct numerical simulation : a tool in turbulent research. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30 :539–578, 1998.
- [102] WF. Noh and PR. Woodward. SLIC (Simple Line Interface Calculation). In Springer-Verlag, editor, *Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics.*, volume 59, pages 330–340, New York, 1976.
- [103] S. Osher and J. Sethian. Fronts propagating with curvature dependant speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, 79 :12–49, 1988.
- [104] BJ. Parker and DL. Youngs. Two and three dimensional Eulerian simulation of fluid flow with material interfaces. Technical Report. UK Atomic Weapons Establishment, Aldermaston, Berkshire, 1992.
- [105] B. Perot and P. Moin. Shear-free turbulent boundary layers. Part 1. Physical insights into near-wall turbulence. *J. Fluid Mech.*, 295 :199–227, 1995.

-
- [106] CS. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *J. Comput. Phys.*, 25 :220–252, 1977.
- [107] R.E. Phinney. The breakup of a turbulent liquid jet in a gaseous atmosphere. *Journal of Fluid Mechanics Digital Archive*, 60(04) :689–701, 2006.
- [108] JE. Pilliod. An analysis of piecewise linear interface reconstruction algorithms for volume-of-fluids methods, 1992.
- [109] JE. Pilliod and EG. Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *J. Comput. Phys.*, 199 :465–502, 2004.
- [110] U. Piomelli, T.A. Zang, C.G. Speziale, and M.Y. Hussaini. On the large-eddy simulation of transitional wall-bounded flows. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 2 :257–265, 1990.
- [111] S. Pirozzoli. On the spectral properties of shock-capturing schemes. *J. Comput. Phys.*, 219 :489–497, 2006.
- [112] S.B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [113] S. Popinet. *Stabilité et formation de jets dans les bulles cavitantes : développement d’une méthode de chaîne de marqueurs adaptée au traitement numérique des équations de Navier-Stokes avec surfaces libres*. PhD thesis, Université Paris 6, 2000.
- [114] S. Popinet and S. Zaleski. A front tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *Int. J. Numer. Meth. Fluid.*, 30 :775–793, 1999.
- [115] A. Prosperetti. Motion of two superimposed viscous fluids. *Phys. Fluids*, 24 :1217–1223, 1981.
- [116] EG. Puckett. A volume-of-fluid interface tracking algorithm with applications to computing shock wave refraction. In H. Dwyer, editor, *Proceedings of the Fourth International Symposium on Computational Fluid Dynamics.*, pages 933–938, Davis, CA, 1991.
- [117] E.G. Puckett, A.S. Almgren, J.B. Bell, D.L. Marcus, and W.J. Rider. A high order projection method for tracking fluid interfaces in variable density incompressible flows. *J. Comput. Phys.*, 100 :269–282, 1997.
- [118] EG. Puckett and JS. Saltzman. A 3D adaptive mesh refinement algorithm for multi-material gas dynamics. *Physica D*, 60 :84–104, 1992.
- [119] RH Rangel and WA Sirignano. The linear and nonlinear shear instability of a fluid sheet. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3 :2392, 1991.
- [120] P. Sagaut. *Simulations numériques d’écoulements décollés avec des modèles de sous-maille*. PhD thesis, Université Paris VI, Paris, France.
- [121] P. Sagaut. Simulations of separated flows with subgrid models. *La Recherche Aérospatiale*, 1 :51–63, 1996.
- [122] P. Sagaut. *Introduction à la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide incompressible*. Springer, 1998.
- [123] P. Sagaut and M. Germano. On the filtering paradigm for LES of flows with discontinuities. *J. of Turbulence*, 6 :Art. No. N23, 2005.
- [124] PH Schweitzer. Mechanism of disintegration of liquid jets. *Journal of Applied Physics*, 8 :513, 1937.

BIBLIOGRAPHIE

- [125] J. Serra. *Image analysis and mathematical morphology*. Academic Press, Inc. Orlando, FL, USA, 1983.
- [126] J.A. Sethian. A fast marching level-set method for monotonically advancing fronts. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 93 :1591–1595, 1996.
- [127] J.A. Sethian. Fast marching methods. *SIAM Rev.*, 41 :199–235, 1999.
- [128] J.A. Sethian. *Level-set methods and fast marching methods*. Cambridge University Press, 1999.
- [129] S. Shin and D. Juric. Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity. *J. Comput. Phys.*, 180 :427–470, 2002.
- [130] C-W. Shu. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. Technical report, ICASE - NASA Report, November 1997.
- [131] CW. Shu and GS. Jiang. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *J. Comput. Phys.*, 126 :202–228, 1996.
- [132] CW. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *J. Comput. Phys.*, 77 :439–471, 1988.
- [133] CW. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II. *J. Comput. Phys.*, 83 :32–78, 1989.
- [134] J. Smagorinski. General circulation experiments with the primitive equations. I : The basic experiment. *Month. Weath. Rev.*, 91 :99–165, 1963.
- [135] LM. Smith and WC. Reynolds. On the Yaghot-Orszag renormalization group method for deriving turbulence statistics and models. *Phys. of Fluids*, 4 :364–390, 1992.
- [136] HB Squire. Investigation of the instability of a moving liquid film. *British Journal of Applied Physics*, 4(6) :167–169, 1953.
- [137] BE Stapper and GS Samuelsen. An experimental study of the breakup of a two-dimensional liquid sheet in the presence of co-flow air shear. *AIAA paper*, pages 89–0461, 1990.
- [138] BE Stapper, WA Sowa, and GS Samuelsen. An experimental study of the effects of liquid properties on the breakup of a two-dimensional liquid sheet. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 114 :39, 1992.
- [139] JJ. Stoker. *Water waves*. Institute of Mathematical sciences. New York University, 1957.
- [140] M. Sussman. An efficient, interface preserving level set re-distancing algorithm and its application to incompressible fluid flow. *Siam J. Sci. Comput*, 1994.
- [141] M. Sussman. A second order coupled level set and volume-of-fluid method for computing growth and collapse of vapor bubbles. *J. Comput. Phys.*, 187 :110–136, 2003.
- [142] M. Sussman and EG. Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 162 :301–337, 2000.
- [143] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, 114 :146–159, 1994.

-
- [144] S. Tanguy. *Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques*. PhD thesis, Université de Rouen, CORIA, 2004.
- [145] O. Tatebe. *MGCG Method, A Robust and Highly Parallel Iterative Method*. PhD thesis, University of Tokyo, 1996.
- [146] G. Taylor and L. Howarth. The dynamics of thin sheets of fluid. I. Water bells. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, pages 289–295, 1959.
- [147] R. Temam. Sur l'approximation de la solution des équations de naviers-stokes par la méthode des pas fractionnaires. *Arch. Rat. Mech. Anal*, 33 :377–385, 1969.
- [148] DJ. Torres and JU. Brackbill. The point-set method : front-tracking without connectivity. *J. Comput. Phys.*, 165 :620–644, 2000.
- [149] A. Toutant, C. Fournier, M. Chandesris, D. Jamet, and O. Lebaigue. Interfacial conditions at a filtered interface for les two-phase flows. In *ICMF 2007*, Germany, 2007.
- [150] P. Trontin, S. Vincent, JL. Estivalezes, and JP. Caltagirone. Detailed comparisons of front-capturing methods for turbulent two-phase flows simulations. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 56(8) :1543–1549, 2008.
- [151] U. Trottenberg and A. Schuller. Multigrid. *Academic Press, Inc*, 2001.
- [152] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and YJ Jan. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2) :708–759, 2001.
- [153] LK Tseng, GM Faeth, and PK Wu. High-Speed Multiphase Mixing Layers, 1991.
- [154] SO. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multifluid flows. *J. Comput. Phys.*, 100 :25–37, 1992.
- [155] H. Uzawa. *Iterative method for concave programming*. Studies in linear and nonlinear programming, Stanford University Press, Stanford, CA, 1958.
- [156] A. Vallet, AA Burluka, and R. Borghi. Development of a Eulerian model for the” atomization” of a liquid jet. *Atomization and Sprays*, 11(6) :619–642, 2001.
- [157] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme II. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *J. Comput. Phys.*, 14 :361, 1974.
- [158] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme V. a second order sequel to Godunov’s method. *J. Comput. Phys.*, 32 :101, 1979.
- [159] S. Vincent, P. Bonneton, and JP. Caltagirone. Numerical modelling of bore propagation and run-up on sloping beaches using mac-cormack tvd scheme. *J. of Hydr. Research*, 39 :41–49, 2001.
- [160] S. Vincent and J.P. Caltagirone. Efficient solving method for unsteady incompressible interfacial flow problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30(6), 1999.
- [161] S. Vincent, JP. Caltagirone, and D. Jamet. Test-case No 15 : phase inversion in a closed box. *Multiphase Sci. Technol.*, 16 :101–104, 2004a.
- [162] S. Vincent, JP. Caltagirone, P. Lubin, and TN. Randrianarivelo. An adaptative augmented lagrangian method for three-dimensional multi-material flows. *Comput. and Fluids*, 33 :1273–1289, 2004.

BIBLIOGRAPHIE

- [163] S. Vincent, J. Larocque, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, and P. Sagaut. Numerical simulation of phase separation and a priori two-phase LES filtering. *Computers and Fluids*, 37(7) :898–906, 2008.
- [164] R.A. Vowels. *Algorithms and data structures in F and Fortran*. Unicomp, Inc., 1998.
- [165] D.T. Walker, R.I. Leighton, and L.O. Garza-Rios. Shear-free turbulence near a flat free surface. *J. Fluid Mech.*, 320 :19–51, 1996.
- [166] J.L. Walsh, J.H. Ahlberg, and E.N. Nilson. Best approximation properties of the spline fit. *J. Math. Mech*, 11 :225–234, 1962.
- [167] ZJ. Wang. Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids. basic formulation. *J. Comput. Phys.*, 178 :210–251, 2002.
- [168] ZJ. Wang. High-order methods for the euler and navier-stokes equations on unstructured grids. *Progress in Aerospace Sciences*, 43 :1–41, 2007.
- [169] ZJ. Wang and Y. Liu. Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids. extension to two-dimensional scalar equation. *J. Comput. Phys.*, 179 :665–697, 2002.
- [170] GB. Whitam. *Linear and non-linear waves*. Wiley Interscience Publication, 1974.
- [171] P.K. Wu, R.F. Miranda, and G.M. Faeth. Effects of initial flow conditions on primary breakup of nonturbulent and turbulent round jets. *At. Sprays*, 5 :175–196, 1995.
- [172] PK. Yeung and SB. Pope. An algorithm for tracking fluid particles in numerical simulations of homogeneous turbulence. *J. Comput. Phys.*, 79 :373–416, 1988.
- [173] JL York, HE Stubbs, and MR Tek. The mechanism of disintegration of liquid sheets. *Trans. ASME*, 75(7) :1279–1286, 1953.
- [174] DL. Youngs. *Time-dependant multi-material flow with large fluid distorsion*. In : Morton, KW., Baynes, MJ. (Eds.), *Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Academic Press, New York, 1982.
- [175] H. Yu, S.S. Girimaji, and L.S. Luo. Latice Boltzmann simulations of decaying homogeneous isotropic turbulence. *Phys. Rev. E*, 71 :016708, 2005.
- [176] K. Yu. *Level-set RANS method for sloshing and green water simulations*. PhD thesis, University Microfilms International, P. O. Box 1764, Ann Arbor, MI, 48106, USA, 2007.
- [177] S. Zaleski, J. Li, and S. Succi. Two-dimensional Navier-Stokes simulation of deformation and breakup of liquid patches. *Physical review letters*, 75(2) :244–247, 1995.