N° d'ordre : 3408

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE DE MATHÉMATIQUES ET INFORMATIQUE

par Paul VIGNEAUX

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique

MÉTHODES LEVEL SET POUR DES PROBLÈMES D'INTERFACE EN MICROFLUIDIQUE

Soutenue le : 12 Juillet 2007

Après avis de :

MM.	Jean-Frédéric GERBEAU	Directeur de Recherche, INRIA Rocquencourt	**Rapporteurs**
	Frédéric GIBOU	Professeur, University of California - Santa Barbara	

Devant la commission d'examen formée de :

M.	Rémi ABGRALL	Professeur, Université Bordeaux 1	**Président**
M.	Didier BRESCH	Directeur de Recherche CNRS, Université de Savoie	**Examinateur**
Mme.	Annie COLIN	Professeur, Université Bordeaux 1	**Rapporteur**
M.	Cédric GALUSINSKI	Professeur, Université du Sud	**Directeur**
M.	Jean-Frédéric GERBEAU	Directeur de Recherche, INRIA Rocquencourt	**Examinateur**
M.	Yen-Hsi Richard TSAI	Professeur, University of Texas - Austin	**Examinateur**

- 2007 -

... se io avessi a ricominciare i miei studii,
vorrei seguire il consiglio di Platone
e cominciarmi dalle matematiche ...

Galileo Galilei

Remerciements

Durant cette initiation de trois ans au métier de chercheur, Cédric Galusinski fût un guide exemplaire. Et comme il arrive au cours des longues courses en montagne, maintes fois renouvelées, il s'y développe confiance et amitié. Pour m'avoir, tour à tour, montré la voie et laissé grimper en tête, je lui exprime ma profonde reconnaissance. J'ai particulièrement apprécié tous ces moments où nous avons fait la trace ensemble et rechausserai volontiers les skis. Son empreinte dans ma formation demeurera certainement longtemps après ce doctorat.

Cette thèse n'aurait pu avoir lieu sans Thierry Colin qui, quelques années auparavant, fût à l'origine de mon penchant prononcé pour les mathématiques appliquées. Probablement grâce à sa joie de vivre et son humour fleuri, ainsi qu'à l'étendue de ses domaines d'expertise. Je souhaite qu'il trouve ici la marque de ma profonde gratitude pour toutes ces expériences scientifiques qu'il a rendues possibles au cours de ces dernières années.

Jean-Frédéric Gerbeau et Frédéric Gibou m'ont fait l'honneur d'accepter de consacrer un temps précieux à la lecture de ce manuscrit. Je tiens à les remercier vivement pour l'intérêt qu'ils ont porté à ces travaux et aux perspectives qu'ils pouvaient ouvrir.

Depuis notre rencontre à l'Ecole Matmeca et régulièrement au cours de cette thèse, nous avons échangé sur certains problèmes d'interface ou d'autres sujets plus éclectiques avec Rémi Abgrall. Je le remercie chaleureusement pour avoir accepté de présider le jury.

Dans notre quête pour simuler l'évolution des gouttes en microcanaux, les nombreux échanges réalisés avec les chercheurs du LOF furent déterminants et constituèrent une source de motivation constante. En particulier, je tiens à remercier chaleureusement Annie Colin, qui a accepté d'examiner ce travail, et Galder Cristobal pour leurs éclairages sur cette hydrodynamique pilotée par la tension de surface.

Richard Tsai a porté une attention particulière sur les résultats de cette thèse et les entretiens que nous avons eus à diverses reprises furent particulièrement enrichissants. Pour toutes ces raisons ainsi que sa présence en tant qu'examinateur, je souhaite qu'il trouve ici l'expression de mes plus vifs remerciements.

Je suis extrêmement reconnaissant à Didier Bresch dont la présence dans ce jury revêt une signification particulière dans la perspective de nos futures collaborations.

Si l'Institut de Mathématiques de Bordeaux constitue un lieu d'excellence pour la formation d'un jeune chercheur, c'est bien sûr grâce à l'ensemble de ses membres avec qui les discussions scientifiques variées sont toujours formatrices. Ainsi désirerai-je exprimer particulièrement ma reconnaissance à Christophe Berthon, Charles-Henri Bruneau, Jean-François Bony, Gilles Carbou, Mathieu Colin, Angelo Iollo, David Lannes et Mazen Saad.
Mais c'est aussi grâce à bien des acteurs dont l'expertise procure d'excellentes conditions de travail. À l'image de l'équipe de la cellule informatique qui fait fonctionner sans compter un

environnement propice au calcul scientifique. Je remercie donc chaleureusement Philippe Depouilly, Jacques Foury, Khodor Khadra, Christian Labesse et Sandrine Layrisse. De même, pour leur disponibilité et leur sympathie sans faille, j'exprime ma reconnaissance à Monique Bourdin, Geneviève Castaignède, Brigitte Cournou, Laetitia Grimaldi, Annie Polzin et Véronique Saint-Martin.

De plus, je remercie tous les doctorants de l'Institut avec lesquels nous avons entretenu d'enrichissants échanges, notamment lors du séminaire Lambda.

Enfin, je tiens à remercier mes proches qui, d'un hémisphère à l'autre, m'ont accompagné dans ce cheminement.

Table des matières

Remerciements **i**

Introduction **1**

Partie 1 : Suivi d'interface et Méthode Level Set **5**

1 Méthodes pour le suivi d'interface **7**
1.1 Notion d'interface 7
1.2 Différents types de méthodes 13
1.3 Enjeux du suivi d'interface 19

2 Composantes de l'approche Level Set **23**
2.1 Principe de la méthode Level Set 23
2.2 Outils 27
2.3 Terminologie Level Set 29
2.4 Variantes de la méthode 33

3 Discrétisations des équations de Hamilton-Jacobi **35**
3.1 Discrétisations (W)ENO en espace 36
3.1.1 schémas ENO 36
3.1.2 schémas WENO 41
3.1.3 Hamiltoniens numériques 42
3.2 Discrétisations en temps 44
3.3 Transport et redistanciation 45
3.3.1 Résolution de l'équation de transport 46
3.3.2 Résolution de l'équation de redistanciation 46
3.4 Cas test pour l'équation de transport 47
3.4.1 Translation diagonale d'un cercle 47
3.4.2 Rotation d'un cercle simple 48
3.4.3 Test de Zalesak 48
3.4.4 Etudes de convergence 48

4 Méthodes pour la redistanciation **73**
4.1 Utilisation de l'équation de redistanciation 73
4.2 Discrétisation réellement upwind 75
4.3 Méthode Fast Marching 89

Partie 2 : Analyse et Résolution numérique d'écoulements bifluides pilotés par la tension de surface 97

5 Modèle bifluide avec tension de surface 99
5.1 Présentation du modèle . . . 99
5.2 Conditions aux limites . . . 102
5.3 Discrétisations et Solveurs . . . 106
5.3.1 Procédure générale . . . 106
5.3.2 Discrétisation en temps . . . 107
5.3.3 Solveur pour l'écoulement . . . 108
5.3.4 Discrétisation en espace . . . 109
5.3.5 Traitement des conditions aux limites . . . 113

6 Une nouvelle condition de stabilité numérique 121
6.1 Etat de l'art . . . 121
6.2 Dérivation d'une condition . . . 123
6.3 Discussion . . . 129
6.4 Une méthode de splitting . . . 131
6.4.1 Détermination de la vitesse scalaire de la goutte . . . 131
6.4.2 Décomposition de l'écoulement . . . 132
6.4.3 Avantages et résultats . . . 134

Partie 3 : Applications à la dynamique de gouttes en microfluidique 137

7 Microfluidique 139
7.1 Introduction . . . 139
7.2 Particularités physiques . . . 141
7.3 Applications visées . . . 145

8 Simulations numériques en 2D 149
8.1 Modèle numérique . . . 149
8.2 Tests et Changements topologiques . . . 150
8.3 Expériences physiques et régimes de mélanges . . . 158

9 Simulations numériques en 3D axisymétrique 169
9.1 Modèle et discrétisations . . . 169
9.2 Régimes de mélange . . . 175
9.3 Création de gouttes . . . 182

Conclusion 191

Bibliographie 197

Table des figures 207

Liste des tableaux 215

Contributions 217

Introduction

Dans son célèbre discours de 1959 [47], Richard Feynman évoque déjà de minuscules machines qui pourraient être présentes en permanence dans le corps humain pour prévenir les défaillances de certains organes. Cette idée lui a été suggérée par Albert Hibbs qui évoquait l'intérêt que pourrait revêtir, en cardiologie, l'introduction d'un *"chirurgien mécanique"* qui se déplacerait dans les vaisseaux sanguins et le coeur pour en inspecter les canaux. Il serait capable de détecter les valves défaillantes et d'effectuer une valvuloplastie.
S'il est clair que nous ne disposons pas encore de tels assistants chirurgicaux, il n'en reste pas moins vrai que l'exploration du monde de l'infiniment petit a sérieusement progressé depuis le discours visionnaire de Feynman. Les réalisations en nanotechnologie permettent désormais de travailler à l'échelle de l'atome (*i.e.* $10^{-9}m$). Cela ne va pas sans poser des questions éthiques essentielles dont il faut dès à présent tenir compte. Nonobstant, les perspectives bénéfiques, tant pour l'homme que son environnement, sont tangibles et importantes. Cela se traduit par un investissement élevé et durable, conduit par la communauté internationale, en faveur des nanotechnologies : on s'attend à une révolution au moins équivalente à celle qu'induisit, en son temps, la *microélectronique*.

Sur cette route qui mène au nanomonde, on rencontre les territoires micrométriques (*i.e.* d'une taille de l'ordre de $10^{-6}m$) dont la microélectronique et la *microfluidique* en sont des représentants emblématiques. La première a permis le développement fulgurant de l'informatique dans les années 1980, dont on mesure l'importance aujourd'hui. La seconde a émergé plus tard, au début des années 1990, en se basant sur l'expérience de cette soeur aînée : depuis une dizaine d'années, elle est à l'origine de maintes réalisations dans les laboratoires de recherche et commence à faire l'objet de convoitises dans le monde de l'industrie. En effet, de par sa capacité à manipuler des fluides au sein de canaux dont la largeur est de quelques dizaines de micromètres, la microfluidique est utilisée dans des domaines aussi variés que la médecine, la pharmacologie, la science des matériaux ou l'environnement [187]. L'un des produits les plus connus du grand public, dont la réalisation a été rendue possible grâce aux découvertes de cette discipline, est l'imprimante à jet d'encre qui produit, de nos jours, des millions de documents sur la planète. Outre le fait que la microfluidique permet d'étudier des phénomènes (*e.g.* des réactions chimiques) uniquement observables à son échelle, elle est aussi à l'origine de systèmes d'analyses médicales beaucoup plus rapides et efficaces que les dispositifs actuels. Ainsi dispose-t-on aujourd'hui de *"puces"* (à l'image de celles des cartes téléphoniques) au sein desquelles on peut analyser des brins d'ADN viral ou détecter l'imminence d'une crise cardiaque. Le premier exemple a été présenté récemment par une équipe de l'université du Colorado à Boulder [178] où une telle puce permet d'identifier une souche grippale en sept heures, contre quatre jours avec les analyses classiques qui utilisent une étape de culture en laboratoire. Le second cas est basé sur la quantification de la présence de protéines myocardes dont la présence élevée signale le déclenchement d'une crise cardiaque. L'analyse est réalisée en quinze minutes alors qu'il faut une dizaine d'heures pour un système traditionnel. L'utilisation de pompes miniaturisées et de microtubes permet aussi d'implanter dans l'organisme

des dispositifs délivrant de l'insuline dans le foie ou du Bactofen dans la moelle épinière, de manière automatique, sans l'intervention du patient [170].

Des réalisations comme une tête d'imprimante à jet d'encre ou ces dispositifs médicaux ont été rendues possibles, entre autres, grâce à la connaissance de la dynamique des fluides en microcanaux. C'est dans cette problématique que s'insèrent les présents travaux.

Cette thèse s'inscrit dans une collaboration entre l'Institut de Mathématiques de Bordeaux (UMR 5251) et le Laboratoire LOF, unité mixte Rhodia - CNRS (UMR 5258), dont le but est de développer des outils haut débit pour augmenter la productivité dans le domaine de la recherche en physico-chimie. Le LOF est constitué d'une équipe pluridisciplinaire qui marie sensibilités académique et industrielle. La microfluidique, la robotique, l'électronique et la micronalyse sont autant de spécialités qu'ils allient pour mener à bien leurs objectifs. Parmi ces nombreux développements, nous nous intéresserons plus particulièrement à l'utilisation d'écoulements de deux fluides non miscibles, dans des microcanaux, qui permettent de manipuler des jets et des gouttes. De tels écoulements peuvent servir à mesurer certaines propriétés rhéologiques des fluides [67] et les gouttes constituent d'excellents microréacteurs pour étudier des cinétiques chimiques [156].

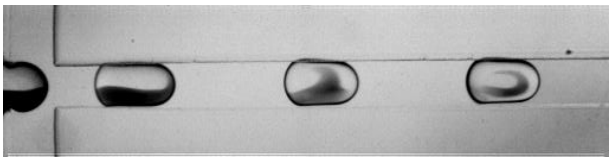


FIG. 1 – Création de gouttes dans un microcanal et étude de la réaction d'un colorant – Image de Galder Cristobal (LOF).

Le but de nos travaux est de développer des approches mathématiques permettant de simuler précisément les écoulements exotiques, présentant des interfaces mobiles, que l'on rencontre dans ces microcanaux.

En effet, la dynamique des fluides rencontrée à ces échelles est non conventionnelle du fait de la prépondérance de la tension de surface (qui est souvent négligeable à l'échelle humaine et au delà). Les écoulements sont généralement laminaires mais on peut exhiber des recirculations substantielles au sein des gouttes qui évoluent dans les microcanaux. Il en résulte des applications importantes pour les phénomènes de mélange dans ces microréacteurs. Cette physique si particulière induit par ailleurs de nouvelles difficultés en analyse numérique : la tension de surface et les vitesses faibles conduisent à la résolution de problèmes raides, les temps de calculs sont prohibitifs [17]. Dans ce mémoire, nous proposons de nouveaux développements dédiés à ces écoulements pilotés par la tension de surface.

Le travail présenté dans cette thèse se compose de trois mouvements.

Dans une première partie, nous présenterons en détails le concept de suivi d'interface, ses applications et certaines méthodes numériques qui ont été mises en oeuvre pour simuler des interfaces mobiles. Chaque méthode s'exprime pleinement dans un champ particulier. Nous

avons utilisé l'une d'entre elles : la méthode *Level Set* [115, 145], pour sa capacité à gérer simplement les changements topologiques que l'on peut rencontrer dans les expériences que l'on souhaite simuler (*cf.* Figure 1). Elle sera décrite précisément au chapitre 2. En effet, depuis son introduction, elle a connu de nombreux développements qui ont conduits à l'amélioration tant de sa précision que de ses temps de calcul. La mise en oeuvre de cette méthode est ensuite donnée de manière explicite dans les chapitres 3 et 4 qui présentent les discrétisations en espace et en temps des équations *Level Set*. Elles sont basées sur les approches ENO (essentiellement non oscillantes) qui n'ont cessé d'évoluer depuis leur création au début des années 1980. Les schémas WENO5 que nous utiliserons permettent d'atteindre une bonne précision. Nous insisterons sur l'équation de redistanciation dont la résolution n'est pas triviale (c'est d'ailleurs là un des points névralgiques pour la conservation de la masse, qui est un défaut souvent mentionné par les détracteurs de cette méthode) et pour laquelle Russo et Smereka ont apporté une contribution décisive [134]. Les méthodes *Fast Marching* seront ensuite décrites puisqu'elles induisent des gains en temps de calcul. Nous arriverons ainsi au terme de cette première partie qui constitue une revue détaillée de l'ensemble des facettes que revêt la méthode *Level Set*, de ses origines aux développements récents.

La deuxième partie revendique deux objectifs fédérés par l'étude des écoulements bifluides pilotés par la tension de surface. D'une part, au chapitre 5, nous présenterons les modèles d'écoulement utilisés pour mouvoir nos interfaces, basés en l'occurrence sur les équations de Navier-Stokes, et leur couplage avec l'approche *Level Set*. La méthode numérique sera intégralement décrite : les conditions aux limites, la discrétisation spatio-temporelle et la technique de résolution de ces équations grâce à une méthode de Lagrangien Augmenté. D'autre part, au chapitre 6, nous présenterons le premier aspect original de ces travaux, lié à l'analyse numérique des schémas de capture d'interface basés sur une approche découplée de la résolution de l'écoulement et du déplacement de l'interface. Il s'agit de la dérivation d'une nouvelle condition de stabilité numérique induite par la tension de surface, lorsque ce terme est discrétisé de manière explicite (ce qui est le cas de la plupart des approches). Cette condition apporte un éclairage nouveau sur le travail de référence de Brackbill, Kothe et Zemach [17], où est introduite l'approche CSF ainsi que la première (à notre connaissance) condition de stabilité capillaire, qui est d'ailleurs celle utilisée à ce jour par la majorité des codes bifluides. Nous constaterons que ce type de condition est très restrictif sur le pas de temps si bien que le coût de calcul est élevé en microfluidique. Il faut noter qu'à ces échelles, grâce à la tension de surface, les interfaces convergent rapidement vers des formes stationnaires, lorsque le canal est droit. Nous proposerons alors une méthode de décomposition qui exploite ces caractéristiques des écoulements et permet de diminuer les temps de simulation. Des tests numériques confirment alors la validité de la condition de stabilité dérivée théoriquement et montrent que la méthode de *splitting* permet de capter précisément les états asymptotiques des interfaces.

Enfin, la troisième partie met à profit les deux premiers mouvements pour réaliser des simulations de dynamique de gouttes en microcanaux. Tout d'abord, au chapitre 7, nous décrivons plus en détails le contexte physique associé aux microcanaux et la géométrie utilisée dans les applications que l'on considère. Il convient ici de mentionner qu'au cours de cette thèse, nous avons implémenté la totalité des outils numériques présentés dans les chapitres précédents, sans partir d'un quelconque code existant. Ainsi avons-nous développé des modules de résolution de l'équation de transport et de redistanciation grâce à des schémas d'ordre élevé (ENO 1 à 3, WENO 5, discrétisation "*truly upwind*", TVD RK 1 à 3), des modules de résolution de l'équation eikonale par la méthode Fast Marching ainsi que deux types de solveur d'écoulement (basés sur une approche volumes-finis). Le premier résoud les équations de Stokes sur une géométrie bidimensionnelle en forme de croix (aussi appellée "flow focu-

sing") couramment utilisée en microfluidique. Le second résoud les équations de Navier-Stokes 3D-axisymétriques, dans un canal cylindrique. Ajoutons que les deux solveurs permettent de prendre en compte des obstacles dans l'écoulement grâce à une méthode de pénalisation [9]. Le chapitre 8 est dédié aux résultats obtenus avec le modèle 2D. Des tests numériques mettant en jeu des effets de tension de surface prépondérants et des changements topologiques permettent de révéler la robustesse et la précision induites par l'implémentation des analyses et méthodes décrites auparavant. Ensuite, nous présentons le deuxième aspect original de ces travaux : la mise en évidence de différents régimes de mélange au sein des microgouttes, en fonction de divers paramètres. Dans un premier temps, nous comparons nos résultats numériques avec les expériences physiques réalisées par nos collaborateurs du LOF, ainsi qu'avec les simulations disponibles dans la littérature : une bonne convergence des différentes approches est constatée. Dans un deuxième temps, nous exhibons numériquement de nouvelles dynamiques, qui, à notre connaissance, ne semblent pas avoir été publiées. Pour finir, le chapitre 9 est consacré aux simulations réalisées avec le modèle 3D-axisymétrique. Les spécificités des régimes de mélange tridimensionnels sont abordées puis l'avantage décisif de ce code est présenté grâce à des simulations numériques réalistes de création de gouttes, par rupture d'un jet induit par deux capillaires cylindriques coaxiaux.

Première Partie

Suivi d'interface et Méthodes Level Set

Chapitre 1

Méthodes pour le suivi d'interface

1.1 Notion d'interface

D'après le New Oxford American Dictionary [106], une *interface* est une surface formant une frontière commune entre deux parties de matière ou d'espace. Il est intéressant de noter que ce terme est plutôt récent. Si nous en appelons à [106], c'est que ce mot est d'étymologie anglaise ; il semble être apparu dans les années 1880 mais c'est vers 1960 qu'il devint couramment utilisé en sciences de l'information (avec un sens plus métaphorique) puis dans d'autres domaines. En français, son sens premier a gardé l'essence de l'origine anglaise puisqu'il représente, en chimie, la surface entre deux phases non miscibles [35]. Certains linguistes lui reprochent d'être moins approprié que d'autres termes dont le sens est plus précis et que son utilisation ne tient qu'au caractère "branché" qu'il confère au discours.

L'intérêt de cette analyse est qu'elle révèle l'omniprésence des interfaces – on parle aussi de *frontières* – dans notre environnement et qu'il s'agit bien d'un concept général pour des structures qui, dans les domaines d'application considérés, peuvent être rebaptisées avec plus d'acuité. Quant aux effets de mode, il faut croire qu'ils sont persistants puisque, depuis 1950, les efforts académiques pour mettre en oeuvre des méthodes tant théoriques que numériques capables de prédire l'évolution d'interfaces mobiles ont généré une vaste littérature.

Aussi, allons-nous décrire quelques exemples impliquant la notion d'interface. Vouloir être exhaustif dans cette énumération est voué à l'échec tant les domaines concernés par ces frontières sont variés. Nous nous efforcerons cependant d'en faire transparaître l'éclectisme dans la suite. S'inspirant des parties que les interfaces mettent en contact, nous cheminerons, des trois états de la matière, vers le concept plus général d'espace.

En mécanique des fluides, les interfaces sont associées à ce que l'on appelle des *écoulements à frontière libre*. Le premier exemple que nous donnons est celui du déferlement plongeant d'une vague sur une plage (*cf.* Figure 1.1). L'interface est ici la surface qui sépare l'eau de l'air (dans un cas comme celui-ci, où l'on peut considérer que la pression dans l'un des deux fluides est constante, on parle plus précisément d'*écoulement à surface libre*). Suffisamment loin du bord, celle-ci a la forme simple d'une onde proche de la sinusoïde. En s'approchant du rivage, le profil de la surface de l'eau se raidit en présentant une pente de plus en plus verticale qui va finir par déferler : l'eau et l'air se trouvent alors mêlés dans le rouleau d'écume qui se propage vers la plage et s'évanouit dans la zone de jet rive. On constate au travers de cette illustration un concentré des difficultés que l'on peut rencontrer lorsque l'on veut décrire des interfaces : mobiles, leur géométrie peut être extrêmement complexe (myriade de gouttes, *cf.* Figure 1.2) et changer de topologie au cours du temps (un jet peut se fractionner en gouttes et, à l'inverse,



FIG. 1.1 – Déferlement plongeant d'une vague : une interface entre l'eau et l'air

des gouttes peuvent fusionner). Au-delà du caractère ludique du déferlement, la modélisation



FIG. 1.2 – Interface eau/air à géométrie complexe et avec des changements topologiques

et la simulation des vagues font partie de recherches stratégiques de la communauté internationale comme le montre l'implication tant des instances environnementales que celles liées à la défense. La prévention des risques induits par des tsunamis en est un exemple marquant.

On peut aussi penser au remplissage des boosters d'une fusée avec du propergol (*cf.* Figure 1.3). Lors de l'injection, sous forme liquide, du propergol dans les réservoirs, l'interface avec l'air peut être constituée de bulles, en plus de la surface libre supérieure. Il faut, autant que possible, éviter que ces bulles d'air restent piégées dans le propergol lors de sa solidification. En effet, il en résulterait une mauvaise combustion de ce carburant après l'allumage du moteur. La simulation numérique de cet écoulement à interface est soutenue par l'industrie spatiale de manière conséquente. Dans ce même secteur, des efforts significatifs ont été menés pour mieux comprendre les mouvements de la surface libre constituée par le carburant liquide dans des réservoirs en apesanteur, suite aux difficultés de pilotage rencontrées lors des missions dans l'espace (on pourra se référer au récent article [186]). En effet, lors de changements de direction et de vitesse, l'inertie du liquide mis en mouvement dans la cuve induit un ballottement qui est à l'origine de la destabilisation de l'appareil. Ceci peut être fatal lors de manoeuvres d'alunissage ou d'arrimage.

Par ailleurs, en ingénierie pétrolière, les taux de récupération des hydrocarbures dans les gisements sont généralement en dessous de 50% et les estimations prévoient un épuisement des ressources aux environs de 2060, d'aprés le Comite Professionnel du Pétrole. Si bien qu'un effort considérable est depuis longtemps fourni pour optimiser l'extraction de ces ressources

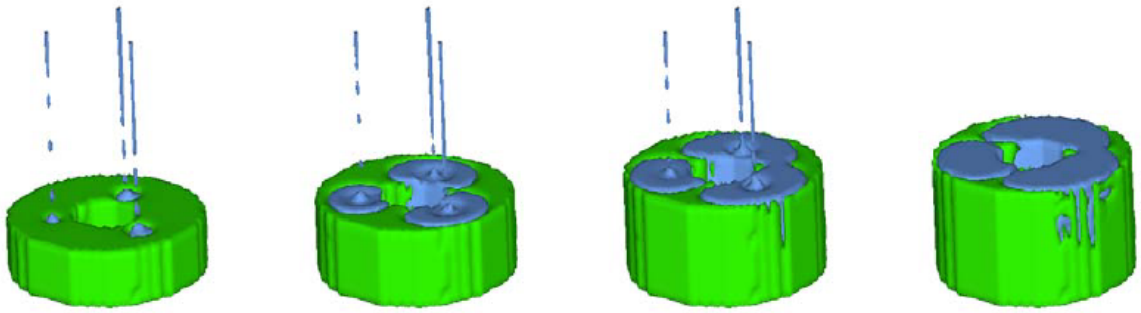


FIG. 1.3 – Simulations de deux coulées successives de propergol dans un booster d'Ariane V [18]. Lors de ce remplissage, qui se fait en une dizaine d'injections à intervalles séparés, le propergol est à l'état liquide mais commence à se solidifier par un processus de réticulation. Il faut prendre garde, lors de ce processus, que des défauts comme des bulles d'air, ne restent pas piégés dans le propergol, une fois qu'il s'est solidifié. En effet, la vitesse de combustion, au décollage de la fusée, en serait altérée.

énergétiques.
Outre la technique intuitive qui permet de récupérer le pétrole par drainage naturel en forant un puit dans le réservoir (on parle alors de *récupération primaire*, qui permet d'extraire, en moyenne, 25% de l'huile), il existe des méthodes plus évoluées qui consistent à injecter de l'eau ou du gaz pour pousser le pétrole vers le puits de production. Il s'agit de la *récupération secondaire* ou *assistée classique*, grâce à laquelle le taux d'extraction peut être porté à 40%. Une nouvelle fois, ces écoulements mettent donc en jeu des frontières mobiles au sein de la roche réservoir et leur description pour améliorer l'exploitation des hydrocarbures est une autre source de motivation pour l'étude du suivi d'interface. D'un point de vue scientifique, ces problèmes sont ici enrichis grâce au couplage de la dynamique avec le milieu poreux, qui est à l'origine de problèmes ouverts intéressants.

En agroalimentaire, le suivi d'interface joue aussi un rôle dans le remplissage des récipients avec des fluides à la rhéologie complexe (yaourts, mousses ou miel, par exemple)

Mais les interfaces ne concernent pas que les milieux fluides. Elles rentrent aussi en jeu dans des problèmes de physique des solides.

Ainsi en est-il des domaines où des surfaces solides évoluent par ablation ou croissance (comme le montre la Figure 1.4), en général sous l'action de facteurs extérieurs. Il peut s'agir de circuits intégrés, désormais omniprésents et objets d'enjeux stratégiques, que l'on grave ou stratifie par déposition [3, 4, 5]. Mais aussi, d'os ou de cartilages endommagés, pour lesquels on peut, par exemple, utiliser des biomatériaux permettant de les reconstituer. Dans le même esprit, la croissance de cristaux et la solidification dendritique constituent des domaines où les méthodes numériques de suivi d'interface se sont amplement exprimées (*cf.*, par exemple, [160, 146, 141, 8, 57]). La Figure 1.5 montre une simulation extraite de Gibou *et al.* [57] ; un pentagone initial croît sous l'effet d'une tension de surface qui dépend de la position, en favorisant les directions diagonales et contraignant le développement de la singularité supérieure. Si les cristaux intéressent les chercheurs parce qu'ils sont de bons candidats pour mesurer des propriétés physiques ou décrypter les complexes et fascinants processus de croissance, il n'en reste pas moins vrai que des avancées décisives en technologie cristalline sont dues à une forte

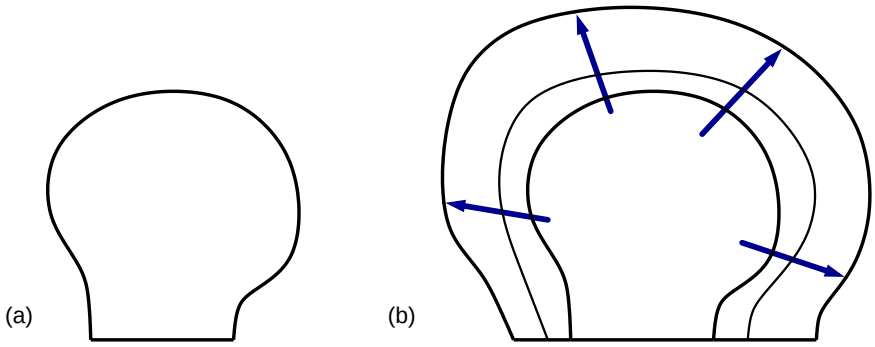


FIG. 1.4 – Le suivi d'interface peut servir à décrire des processus de déposition sur une surface solide initiale (a) qui va croître et atteindre la configuration (b)

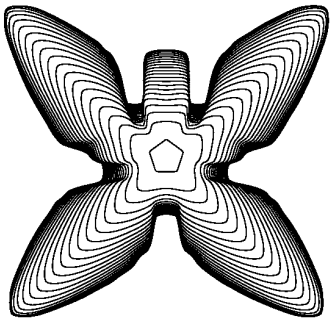


FIG. 1.5 – Simulation en croisance dendritique extraite de [57] : un pentagone (au centre) voit des dendrites se développer préférentiellement suivant les axes diagonaux

demande sociétale. En effet, les domaines de l'électronique, de l'optique ou de l'informatique ont besoin de matériaux semi-conducteurs (*e.g.* le silicium) pour construire processeurs, mémoires, puces ou cellules solaires.

L'un des exemples typiques associés à l'état gazeux de la matière concerne les problèmes de combustion : lorsqu'une flamme brûle, on observe l'interface entre les gaz frais et les gaz brûlés.

Après avoir décrit quelques aspects des interfaces liés à la matière, nous pouvons aborder des cas plus abstraits où les frontières joignent des régions d'un espace. Cet espace pouvant être, par exemple, une image ou une forme géométrique.

Ainsi, une interface, dans le domaine de l'imagerie, peut très bien être constituée par le contour d'une lettre ou d'une forme ayant une couleur A sur un fond de couleur B. Cet énoncé faussement trivial est en fait à l'origine d'une kyrielle d'applications importantes. En effet, à l'heure actuelle, nous disposons de moyens variés d'acquisition d'images au sens large : appareils photos, radars, imagerie par résonance magnétique (IRM) en médecine ... Cependant, une fois ces données enregistrées, elles doivent subir un "traitement" adéquat permettant d'en extraire l'information désirée. C'est particulièrement le cas en imagerie médicale ou en détection radar.

Ayant une image, des méthodes sont nécessaires pour y détecter automatiquement (*i.e.* sans

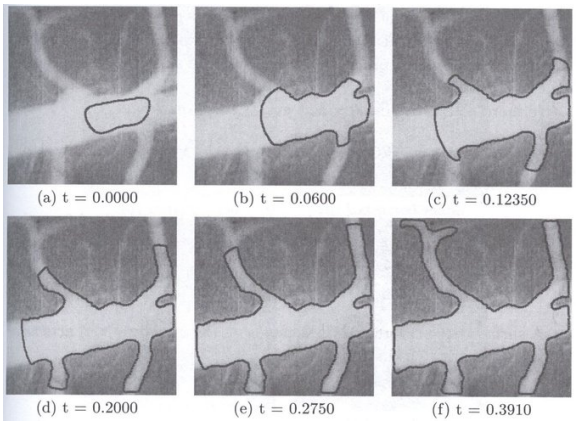


FIG. 1.6 – Une interface (en gris foncé) évoluant pour détecter un réseau artériel en imagerie médicale [100]

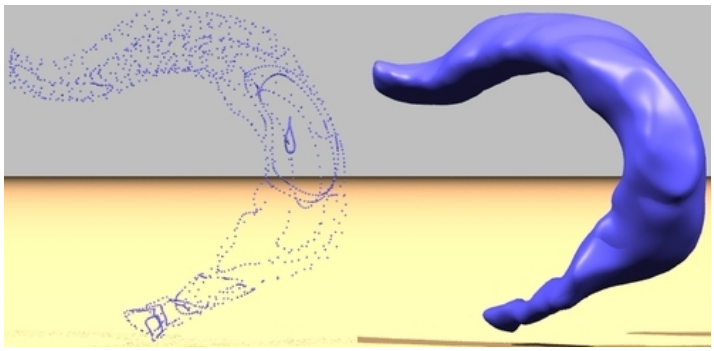


FIG. 1.7 – Suivi d'interface et reconstruction à partir d'un ensemble de points provenant d'une IRM [195]

l'oeil humain ...) une forme particulière. La Figure 1.6 montre comment l'utilisation d'une interface (en gris foncé) se propageant sur un domaine, défini par ses niveaux de gris et extrait d'un angiogramme, permet de reconstituer un réseau artériel. Ces images sont extraites de Malladi *et al.* [100]. Des applications basées sur la même philosophie ont été réalisées pour détecter des structures nuageuses à partir d'images satellite, ou encore pour reconnaître des caractères. De plus, les méthodes de suivi d'interface peuvent êtres utilisées pour améliorer des images bruitées et en donner une version plus lisible.
Au bruitage des données peut se rajouter le fait que l'on ne dispose que d'un ensemble discret de points désordonnés pour en déduire le volume engendré. A partir des acquisitions d'une IRM (qui échantillonnent en "tranches" coplanaires), Zhao, Osher et Fedkiw [195] ont réalisé, grâce à une méthode de suivi d'interface, la reconstitution en trois dimensions du cerveau d'un rat. A gauche de la Figure 1.7 est présenté l'ensemble des points donnés par l'IRM alors qu'à droite, on peut observer la surface reconstruite.

Enfin, pour clore ce tour d'horizon succinct de quelques domaines où des interfaces interviennent, nous abordons l'évolution géométrique des courbes et surfaces. Considérons en particulier une courbe dans $\mathbb{R}^2$, dont l'évolution dépend de ses caractéristiques géométriques

intrinsèques comme sa normale ou sa courbure. Par exemple, dans [62], Grayson a montré que toute courbe simple fermée, se déplaçant sous l'influence de sa courbure, se contracte en un point. En revanche, en utilisant la courbure moyenne, il a aussi montré [63] que ce type de résultat ne s'étendait pas en dimension trois, en exhibant le contre-exemple de la forme d'haltère. Ce type d'évolution géométrique peut être reformulé un problème de suivi d'interface. Ainsi, Chopp et Setian illustrent-ils ces résultats de Grayson dans [29] et [145] dont sont extraites les Figures 1.8 et 1.9.



FIG. 1.8 – Illustration du théorème Grayson où une courbe du plan commence à se contracter vers un point, extrait de [145]

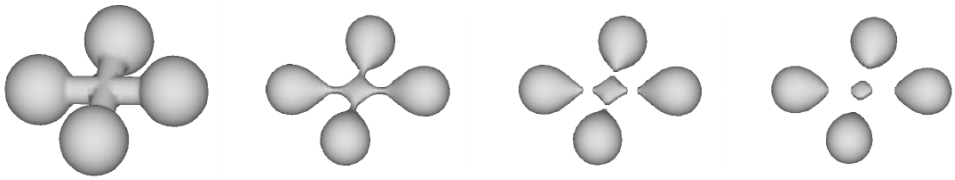


FIG. 1.9 – Illustration du contre-exemple de Grayson où une surface, dans un espace tridimensionnel, se scinde en plusieurs surfaces distinctes, extrait de [29]

Et à titre anecdotique (mais l'est-ce vraiment ?), on peut mentionner que des spécialistes de suivi d'interface ont des liens avec l'industrie cinématographique grâce à l'expertise qu'ils peuvent apporter en images de synthèse (ainsi, Ronald Fedkiw a-t-il travaillé pour des films comme "Shrek", "Terminator" ou "Pirates des Caraïbes" [46]).

Ainsi, au travers des exemples que nous venons d'aborder, comprend-on bien la variété des occurrences du concept d'interface : il offre, tant au chercheur qu'à l'ingénieur, un vaste panel de problèmes ouverts et d'applications aux enjeux sociétaux et scientifiques de première importance. Nous allons maintenant examiner les moyens dont on dispose pour simuler numériquement ces frontières mobiles.

1.2 Différents types de méthodes

La variété des méthodes numériques développées pour réaliser un suivi d'interface est à l'image de ses champs d'application : il est difficile de toutes les recenser.

On peut cependant dégager des tendances communes qui permettent de classifier les méthodes suivant :

- qu'elles représentent l'interface de manière diffuse ou ponctuelle ;
- qu'elles suivent explicitement ou capturent implicitement l'interface ;
- leur nature lagrangienne ou eulérienne ;
- qu'elles couplent ou non le déplacement de l'interface avec les modèles qui fournissent la vitesse du mouvement (*e.g.* les équations de la mécanique des milieux continus, qui serviront dans cette thèse).

Lorsqu'une interface est une frontière entre deux milieux physiques, il est justifié de s'interroger sur l'épaisseur de la zone de transition. En effet, à l'échelle des molécules, une zone de mélange entre les deux espèces peut être schématisée comme sur la Figure 1.10. D'un point de vue de la modélisation, il est nécessaire de déterminer si l'on peut considérer que l'interface est d'épaisseur nulle - introduisant ainsi des discontinuités dans les quantités caractéristiques du milieu physique (*e.g.* la densité ou la viscosité) - ou si, au contraire, ces quantités doivent présenter une transition rapide mais continue. Dans le premier cas, les modèles obtenus sont dits à *interface ponctuelle*, alors que dans le second, on parlera d'*interface diffuse*.

L'un des avantages de l'approche diffuse est qu'elle permet d'incorporer une description plus

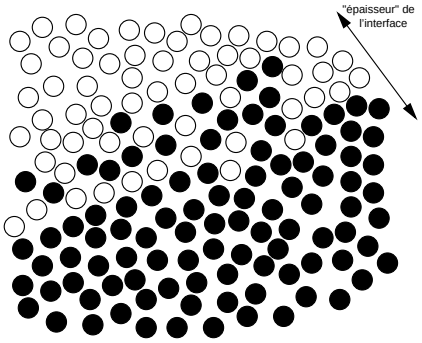


FIG. 1.10 – Zoom à l'échelle moléculaire sur la zone entre deux milieux. Une interface est-elle diffuse ou ponctuelle ?

riche de la physique près de l'interface, notamment du point de vue de la thermodynamique, des changements de phase et des processus de mélange. Les modèles de champ de phase (ou "Phase-Field") utilisent ainsi une énergie libre qui est définie via un potentiel à double puits caractérisant l'équilibre des deux phases en présence [80]. Un exemple classique utilisant ces interfaces diffuses est constitué par les modèles de type Cahn-Hilliard [16, 91]. Alternativement, dans la méthode du Second Gradient, l'énergie libre dépend de la densité et de son gradient [81, 82]. Par ailleurs, il convient aussi de mentionner les modèles multifluides compressibles [88, 153, 138, 1], qui se distinguent notamment par le caractère intégré de l'approche dont nous donnerons la définition juste aprés.

Dans les travaux de ce manuscrit, nous nous intéresserons essentiellement à des interfaces ponctuelles.

Ensuite, nous proposons d'envisager le passage d'une représentation continue de l'interface à sa formulation discrète, étape indispensable à la mise en oeuvre d'une résolution *in silico*. Considérons donc une interface constituée d'une courbe se mouvant dans $\mathbb{R}^2$, à l'image de la Figure 1.11-a. Intuitivement, la première idée à laquelle on pense, pour discrétiser cette

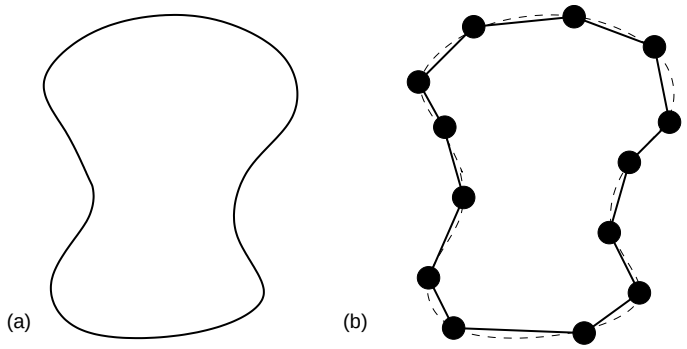


FIG. 1.11 – Du continu au discret : approche intuitive de la représentation d'une interface

courbe, est de disperser des points sur l'interface comme le montre la Figure 1.11-b. Pour la déplacer, il suffit alors de mouvoir chaque point et la courbe, à un instant ultérieur, s'obtient en interpolant cet ensemble de "traceurs" comme illustré sur la Figure 1.12. Cette manière

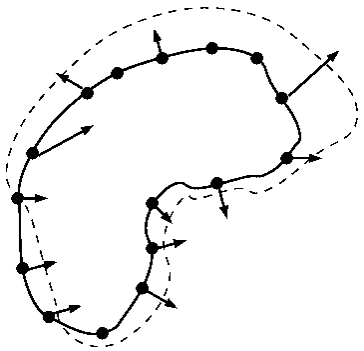


FIG. 1.12 – Déplacement d'une interface par l'intermédiaire des points de sa caractérisation discrète : la courbe noire en trait continu évolue vers la courbe noire en pointillés grâce à l'interpolation de la nouvelle position des marqueurs (disques noirs) qui se sont déplacés sous l'action des vitesses représentées par les flèches

de réaliser le suivi de l'interface n'est autre que celle adoptée par les méthodes dites "*front tracking*" car elles réalisent un *suivi explicite* de l'interface à l'aide des particules qui la discrétisent. Cette approche est à opposer aux méthodes dites "*front capturing*" qui capturent l'interface en la caractérisant *implicitement* à l'aide de la ligne de niveau d'un champ scalaire ou d'une fraction volumique ; nous préciserons ces alternatives dans la suite.

Par ailleurs, lorsqu'en particulier on s'intéresse à des fluides, la nature *lagrangienne* ou *eulérienne*, du modèle utilisé pour déterminer la vitesse qui anime la frontière, est un autre moyen de distinguer les méthodes de suivi d'interface.
Ainsi, dans les méthodes lagrangiennes, un volume discrétisé contient toujours les mêmes particules fluides, si bien qu'elles utilisent souvent des maillages mobiles non structurés dont les éléments épousent la forme de l'interface. En conséquence, elles peuvent intégrer très précisément les conditions aux limites au niveau de la frontière entre les deux milieux. En contrepartie,

elles demandent de remailler à chaque pas de temps ce qui joue un rôle dans la durée des simulations. De plus, en multidimension, ces maillages peuvent s'enchevêtrer et ont du mal à gérer des grandes déformations dues au cisaillement ou à la vorticité.
Quant aux méthodes eulériennes, elles sont caractérisées par l'utilisation d'un maillage fixe (souvent structuré) au travers duquel circulent les particules fluides. Elles peuvent cependant donner des solutions présentant une diffusion artificielle et ont du mal à conserver la raideur des interfaces.
Il existe aussi des méthodes mixtes combinant approches lagrangienne et eulérienne.

Enfin, la classification des méthodes de suivi d'interface peut aussi se baser sur la nature de la relation entre la méthode qui détermine la vitesse de déplacement de la frontière et la méthode qui induit effectivement son mouvement. Ainsi distingue-t-on les approches *intégrées* et *découplées*. Considérons des interfaces fluides. Dans la première approche, les équations de l'écoulement et la nouvelle position de l'interface sont résolues de manière simultanée, pour un instant ultérieur, grâce à un système global. Dans la seconde approche, on réalise un découplage en figeant l'interface pour calculer l'écoulement associé, qui sera alors utilisé pour transporter l'interface et en déduire sa nouvelle position.

Nous allons maintenant passer en revue quelques travaux réalisés en suivi d'interface.

Les méthodes lagrangiennes sont naturellement associées aux approches "front tracking" et découplées. Ainsi en est-il des travaux de Hirt *et al.* [73] dans un cadre volumes-finis ou ceux de Kawahara et collaborateurs en éléments-finis [126, 113], qui sont basés sur une approche strictement lagrangienne. D'autre part, la méthode particulaire sans maillage SPH (Smooth Particle Hydrodynamics) a été utilisée, entre autres, par Monaghan [108] et plus récemment par Morris [109] qui porte une attention particulière sur le traitement de la tension de surface. On peut aussi mentionner les méthodes de type lattice Boltzmann [24, 58, 79]. Par ailleurs, une autre grande classe d'approche fait intervenir des formulations intégrales. Une revue des méthodes d'intégrales de frontière (Boundary Integral Methods) est réalisée dans [75, 123]. Etant très précises, elles servent souvent de référence pour réaliser des comparaisons avec d'autres méthodes ; cependant, elles ne peuvent s'appliquer qu'à un nombre restreint de situations (*e.g.* uniquement des écoulements à potentiel, en mécanique des fluides).

Parmi les approches mixtes, l'une des plus connues est la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) introduite par Hirt *et al.* dans [74]. L'idée générale de cette méthode se compose de trois ingrédients. D'une part, une étape lagrangienne qui permet de déterminer les variables d'état à un pas de temps intermédiaire. D'autre part, une phase implicite qui résout les équations de conservation de la quantité de mouvement. Enfin, une étape de remaillage où les points des cellules sont déplacés avec l'écoulement, de manière à éviter une dégradation de la grille par distorsion des éléments (au cours de cette étape, il faut donc aussi réactualiser les variables d'état, aux nouveaux points de grille obtenue). Le qualificatif "*arbitraire*" vient du fait que les points du maillage peuvent, soit rester fixes (caractère eulérien) dans certaines zones (notamment loin de l'interface), soit être déplacés avec le flot (caractère lagrangien) dans d'autres zones (en particulier près de l'interface, où l'adaptation du maillage permet un gain naturel de précision). La méthode ALE introduit donc une flexibilité dans la gestion des grilles qui en fait une approche très attractive pour simuler des écoulements à frontière libre. Elle a ensuite fait l'objet de nombreuses variations et applications. Par exemple, Ramaswamy

et Kawahara [125] l'utilisent pour simuler des ondes solitaires ou des ballottement de surfaces libres dans des réservoirs. Maury [104] ainsi que Hu *et al.* [76] s'en servent pour des écoulements chargés en particules solides. Récemment, Gerbeau *et al.* ont utilisé la méthode ALE pour des interfaces mobiles en magnétohydrodynamique (MHD) [54, 55, 52].

En ce qui concerne les méthodes eulériennes, elles ont été couplées tant aux techniques d'interface-tracking que d'interface-capturing.

On peut distinguer deux sous-catégories pour "traquer" (on utilise cette adaptation de l'anglais du fait que "poursuivre" / "serrer de près" est l'un des sens de ce mot [35]) une interface. D'une part, l'approche "*volume-tracking*" qui consiste à répartir des particules dans les cellules du maillage pour "marquer" la présence d'un fluide en son sein. La différence avec une méthode lagrangienne pure est que l'écoulement est calculé de manière eulérienne sur un maillage fixe et que seules les particules se voient déplacées afin de pouvoir poursuivre l'interface. Ainsi, avec ce type d'approche, la représentation de l'interface n'est pas stockée mais seulement reconstruite grâce aux marqueurs lorsque l'on en a besoin.
Un exemple qui a fait école est la méthode marker-and-cell (MAC) proposé dans le travail fondateur d'Harlow et Welch [70] en 1965. Cette contribution est fondamentale tant pour la simulation des surfaces libres que pour sa fameuse discrétisation sur maillage décalé en vitesse et pression (dont nous reparlerons par la suite). Dans cet article, des maillages cartésiens fixes sont utilisés de concert avec des différences finies. Harlow et Shannon (1967) en présentent l'application au cas d'une goutte tombant sur une surface libre dans [69] dont est extraite la Figure 1.13. Cette approche a ensuite été une source d'inspiration pour d'autres travaux qui

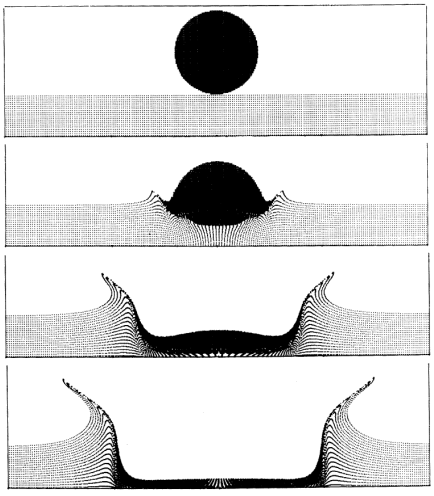


FIG. 1.13 – L'éclaboussure provoquée par l'impact d'une goutte sur une surface libre, simulée par Harlow et Shannon dans un article de 1967 [69] utilisant la méthode MAC

l'ont rendue plus robuste et adaptative. Le lecteur pourra consulter les articles plus récents [111] (éléments finis), [173, 174] (différences finies), ainsi que les références qu'ils contiennent, pour avoir une idée plus précise des variantes MAC. Il faut noter qu'au cours de la simulation, les marqueurs peuvent se concentrer dans certaines régions aux dépens d'autres zones qui se retrouvent donc avec un déficit d'informations associées aux traceurs. Il faut alors mettre en oeuvre des algorithmes de redistribution homogène des particules, à appliquer régulièrement au cours de la simulation, pour conserver la précision.

D'autre part, l'approche "*surface-tracking*" qui consiste à disposer des particules, non pas dans tout le volume induit par une interface, mais uniquement sur l'interface elle-même. L'interface s'obtient alors en interpolant des courbes en 2D (resp. des surfaces en 3D) avec cet ensemble de points. Pour cela, il faut donc qu'à chaque pas de temps, les coordonnées des points et leur ordonnancement soient réactualisés et sauvés en mémoire. De même que précédemment, le déplacement des marqueurs permet de déterminer l'évolution de l'interface.
De telles approches ont notamment été développées par les groupes de Glimm [59, 60] et Tryggvason [183, 179] et sont connues sous le nom de méthodes "front-tracking" ; même si, comme nous venons de le voir, ce qualificatif recouvre d'autres aspects. La gestion des particules peut se révéler fastidieuse et constitue parfois une des limites de ces techniques, notamment lorsqu'il faut simuler des changements topologiques et des domaines tridimensionnels. Ces cas ont été abordés et des résultats ont été obtenus, mais au prix d'une implémentation et de coût CPU considérables. Une voie pour pallier ces problèmes est de simplifier la manipulation des particules en s'affranchissant des procédures d'ordonnancement qui donnent la connectivité des marqueurs de l'interface. On pourra consulter les articles de Torres et Brackbill [177], Juric et Tryggvason [86] ou Shin et Juric [148] pour une description de ce type d'algorithmes et les résultats de simulations 2D et 3D.
Pour les problèmes d'interaction fluide-structure, il existe aussi la méthode des frontières immergées (Immersed Boundary Method) qui utilise un maillage fixe pour un calcul eulérien de l'écoulement et un suivi lagrangien des points répartis sur la structure. Charles Peskin a utilisé cette approche pour initier une série de travaux de référence, notamment en relation avec la simulation des écoulements sanguins dans le coeur [119, 120, 93]. C'est une approche qui fait désormais école et l'objet d'actives recherches [181, 43, 94, 36].

Nous en arrivons enfin aux méthodes eulériennes qui "capturent" l'interface grâce à un champ scalaire f qui la définit implicitement. Une équation de transport est alors utilisée pour mouvoir f et donc connaître l'évolution du front. La régularité de ce champ permet alors de distinguer à nouveau deux sous-catégories.

D'une part, il peut s'agir d'une fonction discontinue, de type Heaviside, dont le créneau matérialise le passage d'un milieu à l'autre. Plusieurs travaux utilisent ce type de fonctions à l'image d'Olsson et Kreiss [114] ou de la méthode CIP (Constrained Interpolation Profile) de Yabe [188].
Une autre grande classe d'approche eulérienne à "capture discontinue" est constituée par les méthodes VOF (Volume-Of-Fluid) où le champ f n'est autre que la fraction volumique de fluide contenu dans une cellule du maillage. Par exemple, si l'on considère le mouvement d'une interface séparant deux fluides A et B dans un domaine rectangulaire, on peut définir f comme étant la fraction du volume occupé par le fluide A sur le volume de la cellule. Ainsi, dans une maille occupée uniquement par le fluide A, la valeur de f est 1, alors que dans une maille contenant uniquement le fluide B, $f = 0$; les cellules contenant l'interface présentent une valeur comprise entre 0 et 1 comme l'illustre la Figure 1.14. L'essence de l'approche VOF réside dans le déplacement de l'interface grâce au transport lagrangien d'un segment (en 2D) d'interface reconstruit à l'aide de la fraction volumique. C'est essentiellement l'étape de reconstruction qui distingue les différentes variantes de la méthode VOF. Ainsi, la version la plus simple, décrite par Noh et Woodward [112] en 1976, représente l'interface avec des segments parallèles au maillage (en tenant compte du vecteur vitesse pour choisir entre l'une des deux directions), comme on peut le voir sur la Figure 1.15-(b). Elle est qualifiée de méthode VOF - SLIC (pour Simple Line Interface Calculation). Mais il existe aussi une version plus précise de reconstruction, appellée VOF - PLIC (pour Piecewise Linear Interface Calculation), qui conduit à des interfaces non alignées avec le maillage (*cf.* Figure 1.15-(c)). Leur direction se

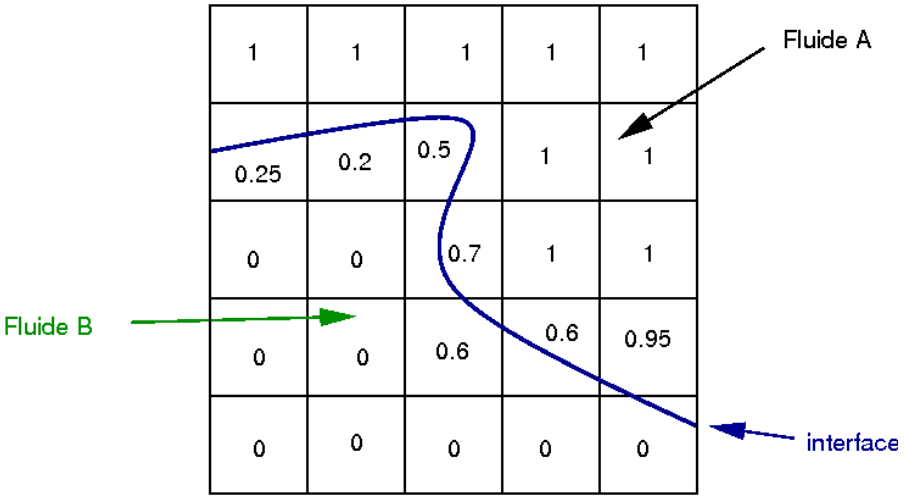


FIG. 1.14 – Méthode VOF sur un maillage cartésien : représentation discrète d'une interface à l'aide de la fraction volumique f, relativement au fluide A.

calcule grâce au gradient de f qui donne la normale à l'interface. De Bar en avait déja réalisé l'implémentation en 1974 [40]. Ensuite, des améliorations successives ont été apportées tant dans l'étape de reconstruction que dans l'étape lagrangienne de transport de ces segments reconstruits, conduisant à une importante littérature dont [130, 64]. On pourra consulter la revue [139] faite par Scardovelli et Zaleski pour plus de détails et leur article [140] pour des développements plus récents sur la procédure reconstruction/transport. L'avantage principal

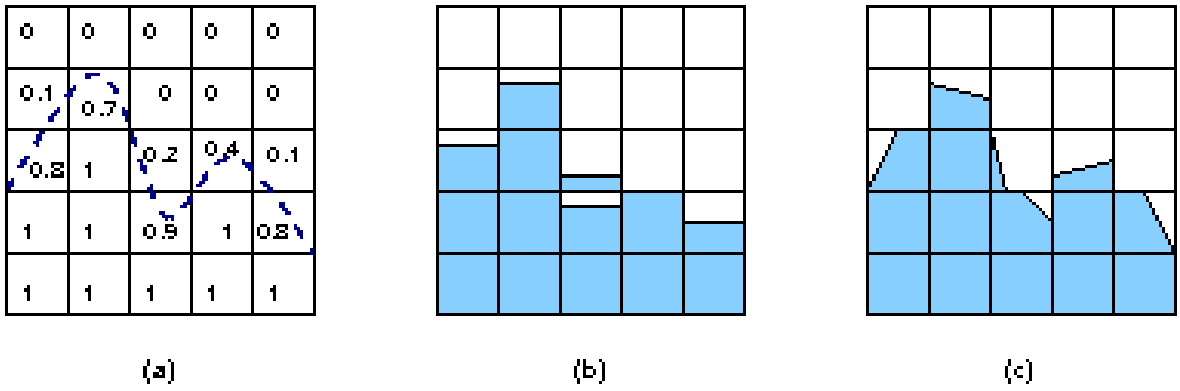


FIG. 1.15 – Différentes reconstructions géométriques de l'interface, à partir de la fraction volumique (a) : méthode SLIC originelle (b), méthode PLIC (c)

des méthodes VOF est que, par construction, elles conservent le volume des fluides transportés. Elles ont été utilisées avec succés dans maintes applications tant en 2D qu'en 3D. Notons cependant que l'extension en 3D est fastidieuse à mettre en oeuvre.
Il convient aussi de noter que l'introduction de la méthode CSF (*Continuum Surface Force*), dans l'article fondateur de Brackbill *et al.* [17], pour traiter le terme de tension de surface a été présentée avec une approche VOF. Nous reparlerons de cette gestion de la tension de surface dans la partie 2.

D'autre part, le champ scalaire capturant l'interface peut être continu. Essentiellement,

l'une des courbes de niveau de f sert à localiser le front. Ce type d'approche est notamment utilisé par les méthodes dites de "pseudo-concentration" [172] et celles dites des "lignes de niveau" [145, 115]. Nous resterons bref sur leur principe qui fera l'objet d'une étude détaillée au chapitre suivant.

1.3 Enjeux du suivi d'interface

Lorsque l'on développe des outils numériques pour simuler des problèmes à interfaces mobiles, il est d'usage de s'interroger sur les éléments clés qui vont permettre de faire le choix d'une méthode. Ici, nous considérons plus particulièrement des applications où il s'agit de suivre le déplacement d'un milieu physique par rapport à un autre – milieux à choisir, par exemple, parmi des solides, des liquides ou des gaz. Cependant, certaines idées qui suivront sont aussi valables pour des interfaces plus générales (comme en géométrie ou en imagerie). On compte, au nombre de ces enjeux, les aspects suivants :

- la physique qui gouverne le phénomène ;
- le degré de précision souhaité, relativement à chaque caractéristique que le problème peut exhiber ;
- la robustesse et l'adaptativité du code de calcul ;
- le coût d'implémentation de la méthode et les temps de calculs nécessaires pour obtenir les résultats de la simulation.

Nous allons détailler ces points dans la suite.

En ce qui concerne la physique, tant les modèles d'interface que ses représentations discrètes vont influer sur la détermination d'une stratégie adaptée.
Comme nous l'avons vu précédemment, les modèles à interfaces diffuses sont de bons candidats lorsque l'on veut prendre en compte une physique complexe d'échange dans une zone de transition dont l'épaisseur est de l'ordre de la longueur caractéristique du domaine de calcul. C'est le cas pour des processus de mélange ou de changement de phase. Il est plus difficile d'incorporer de tels raffinements dans les modèles à interface ponctuelle, à moins de disposer de descriptions homogénéisées consistantes qui peuvent apparaître comme des termes sources localisés sur le front.
Ensuite, certains phénomènes physiques dépendent fortement de la géométrie de l'interface (*e.g.* la tension de surface). D'un point de vue discret, il faudra donc que les représentations de l'interface permettent de déterminer fidèlement ces quantités liées à sa géométrie. Et dans ce domaine, toutes les méthodes numériques ne sont pas équivalentes. Nous allons en reparler très rapidement.

Il arrive souvent qu'un problème de physique exhibe plusieurs phénomènes. Par exemple, lorsqu'une houle se propage sur un fond en forme de marche, il est classique d'avoir à considérer les quatre effets que sont l'onde réfléchie, la variation de vitesse, l'augmentation de l'amplitude (*shoaling*) et la perte de symétrie du profil de l'onde transmise. En modélisation, si l'on a déjà la chance d'avoir un modèle qui capte la plupart des phénomènes physiques, il faut aussi savoir s'il en est de même pour la méthode numérique et avec quelle précision. Suivant l'effet que l'on souhaite étudier en priorité, on s'orientera vers la méthode la plus adaptée.

En toute généralité, les méthodes lagrangiennes qui utilisent des maillages mobiles peuvent être très précises pour l'étude de mouvements à amplitude raisonnable. En revanche, elles ont plus de mal à gérer des grandes déformations, à l'image des problèmes de distorsion de maillage et de superposition d'arêtes. Quant aux approches eulériennes à maillage fixe, elles s'affran-

chissent de ces limitations et peuvent simuler d'amples déplacements du front. Cependant, elles ont une tendance naturelle à diffuser les interfaces et à lisser les chocs. Elles conservent donc mal le caractère ponctuel d'une interface.

Il existe bien sûr des méthodes pour pallier ce type de problèmes. En lagrangien, des méthodes de remaillage ont été développées. C'est un art à part entière qui a généré de nombreux travaux. Des solutions existent en 2D ainsi que des extensions en 3D mais avec une complexité croissante. Dans tous les cas, les temps de simulation sont allongés par ces reconstructions de grilles, parfois même dans des proportions les rendant inaccessibles pour les applications réelles, sur les machines actuelles. En ce qui concerne les méthodes particulaires, nous avons vu à la section précédente qu'elles nécessitent une redistribution des marqueurs au cours des calculs, afin d'avoir une répartition homogène de l'information. Des algorithmes existent mais augmentent eux aussi le temps de calcul et la complexité.

Revenons maintenant un instant sur la représentation discrète de l'interface avec des particules, tout comme nous l'avons vu sur la Figure 1.11 avec la variation suivante : considérons, non pas une, mais deux interfaces à l'image de la Figure 1.16-a. On suppose qu'à l'itération suivante, ces deux "gouttes" ont fusionné, donnant naissance à une seule goutte plus grande. Comme on le voit sur la Figure 1.16-b (à l'intérieur de la zone en pointillés), certaines particules, aprés leur transport lagrangien, se retrouvent à l'intérieur de la grande goutte ; par conséquent elles doivent être supprimées car elles ne font plus partie de la nouvelle interface. La "chirurgie" qui consiste à enlever les points superflus et à recoller les interfaces en cas de fusion (resp. à ajouter des marqueurs et créer deux interfaces en cas de séparation) peut rapidement devenir très compliquée. Le défi est d'autant plus criant en trois dimensions. Il a été relevé par les méthodes *front-tracking* au prix d'une implémentation technique. Les méthodes qui capturent implicitement l'interface gèrent beaucoup plus simplement ces changements topologiques. Nous en verrons un exemple au chapitre suivant.

L'illustration précédente nous permet aussi d'aborder la difficulté liée au calcul des quantités associées à la géométrie de l'interface. En effet, il est parfois nécessaire de calculer la normale et la courbure du front. On conçoit aisément qu'avec une représentation discrète de l'interface via un ensemble de particules, les méthodes d'interpolation utilisées pour reconstruire l'interface vont jouer un rôle crucial dans l'obtention d'une courbure consistante. De ce point de vue, si elles utilisent des fonctions adaptées, les méthodes de capture peuvent calculer simplement et précisément une courbure, sans avoir besoin d'interpoler. Ce n'est pas le cas des méthodes *front-tracking* et VOF qui nécessitent des algorithmes d'autant plus évolués que la dimension étudiée est grande. D'ailleurs, plusieurs articles traitent de cet aspect puiqu'il est l'une des causes de calculs de vitesses non physiques, connues sous le nom de "*courants parasites*". Nous en reparlerons dans la deuxième partie de ce manuscrit.

Un autre enjeu important apparaît dans les applications physiques liées à la simulation d'écoulements incompressibles : il faut que la masse (ou, de manière équivalente, le volume) des fluides en présence soit conservée. En général, les méthodes qui suivent l'interface de manière lagrangienne et la méthode VOF sont sur ce point bien plus performantes que les méthodes de capture. Nous commenterons cet aspect dans le chapitre 2, en présentant des outils qui permettent d'améliorer les capacités des approches *front-capturing* dans ce domaine.

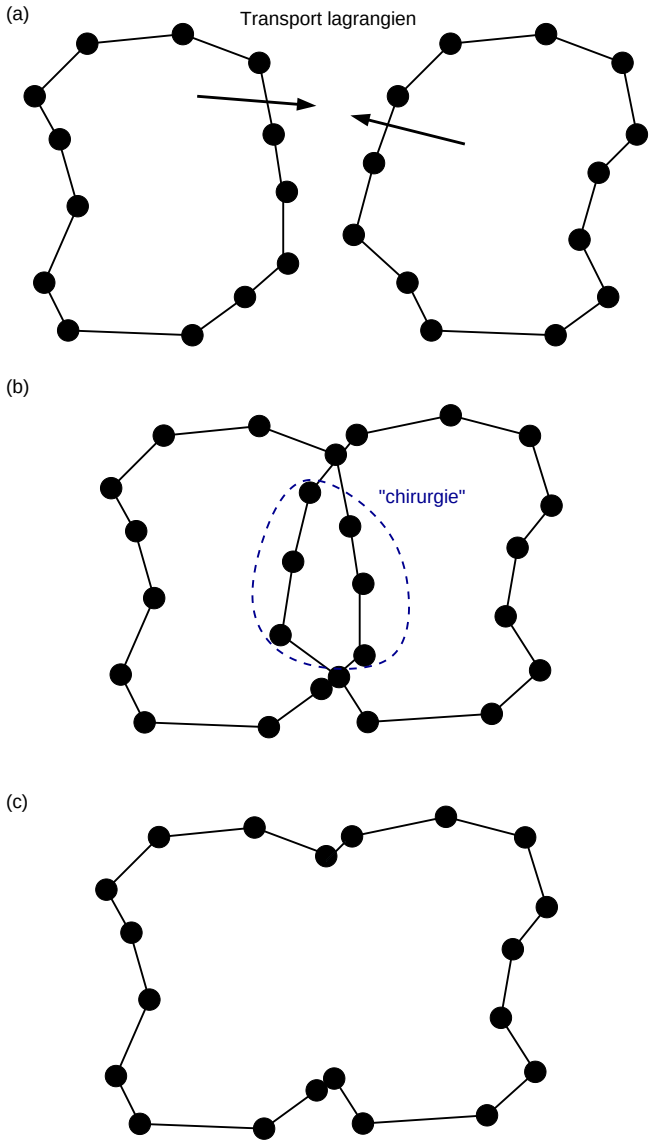


FIG. 1.16 – Examen formel de la gestion des changements topologiques avec une méthode lagrangienne. Deux interfaces vont fusionner (a). Après le transport lagrangien des particules (b), certaines (zone en pointillés) se retrouvent à l'intérieur de la nouvelle interface obtenue et une opération "chirurgicale" est nécessaire pour les supprimer. Une fois la procédure effectuée (c), il ne reste que des marqueurs *sur* l'interface.

Ainsi, aurons-nous bien senti, au terme de ce chapitre, que les applications faisant intervenir un suivi de front sont multiples, tout comme les approches numériques disponibles pour simuler l'évolution de ces interfaces. Cette profusion de méthodes s'explique de manière naturelle puisque *in fine*, comme dans bien des domaines, la panacée n'existe pas. Ces méthodes sont toutes efficaces dès qu'elles s'expriment dans le champ d'application pour lequel elles ont été conçues. C'est à son sens de la modélisation qu'il faut faire appel pour mettre en oeuvre la stratégie *ad hoc*.

Dans le prochain chapitre, nous allons nous attacher à l'une d'entre elles : la *Méthode Level Set*.

Chapitre 2

Composantes de l'approche Level Set

En 1988, Osher et Sethian publient une synthèse d'expertises en évolution d'interfaces et lois de conservation hyperboliques dans un article [116] baptisant une technique qui fait désormais école : la *méthode Level Set* (En fait, ce nom apparaîtra explicitement en temps que formulation "plénière" dans deux articles ultérieurs de 1992 [110] puis 1994 [169] mais c'est l'article de 1988 qui est classiquement cité dans la littérature comme étant la référence fondatrice de cette méthode). Ces expertises tissèrent des liens entre des résultats, tant théoriques que numériques, concernant le suivi d'interface (notamment pour des problèmes de front de flammes en combustion) *et* les équations de Hamilton-Jacobi. La symphonie *Level Set* pouvait commencer ...

Vingt ans plus tard, il devient difficile de recenser et de prévoir les champs d'applications de la philosophie Level Set : ils se confondent avec ceux mettant en jeu des interfaces mobiles. De la mécanique des fluides numérique au traitement d'images en passant par la science des matériaux, l'optimisation ou la propagation d'ondes sismiques, nombre de problèmes ont été reformulés pour être résolus par la méthode Level Set ou ses dérivés. Cette approche féconde s'est, en effet, enrichie successivement de divers outils qui l'améliorèrent tant du point de vue de la précision que de la rapidité de calcul. Avec ses spécificités propres, elle constitue une classe de techniques incontournable pour certains problèmes de suivi d'interface, aux côtés des méthodes de type *front tracking* et *Volume of Fluid* (VOF) dont nous avons parlées précédemment.

Dans ce chapitre, nous allons présenter la technologie Level Set et ses composantes. Ces descriptions sont directement inspirées des deux ouvrages de référence que sont celui d'Osher et Fedkiw [115] ainsi que celui de Sethian [145]. Le lecteur intéressé pourra s'y reporter tant pour prendre connaissance des champs d'application variés que des bibliographies détaillées qu'ils contiennent. En effet, dans la suite de ce manuscrit, la mécanique des fluides constituera le cadre sous-jacent des problématiques de suivi d'interface étudiées.

2.1 Principe de la méthode Level Set

Pour présenter simplement la méthode Level Set, nous allons considérer l'étude de l'évolution d'une interface vivant dans un espace de dimension 2. Soit donc Γ une telle interface, bornant un ouvert Ω_1 de $\mathbb{R}^2$ (éventuellement multiplement connexe), séparant un milieu 1 (représenté par Ω_1) d'un milieu 2, à l'image de la Figure 2.1. On veut étudier et calculer le déplacement de Γ induit par un champ de vitesse $\mathbf{v}$. Cette vitesse peut dépendre de l'espace, du temps, des caractéristiques géométriques de l'interface (e.g., la normale ou la courbure) et/ou de la physique environnante.

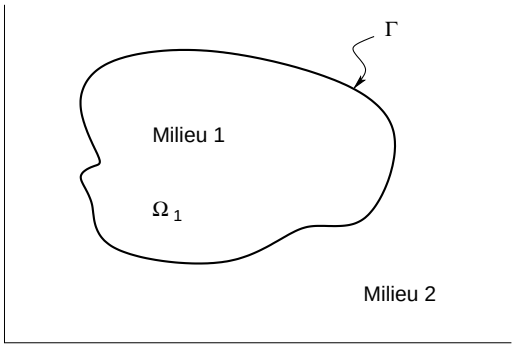


FIG. 2.1 – Une interface Γ dans $\mathbb{R}^2$

D'une part, comme son nom l'indique, la méthode consiste à caractériser Γ comme étant l'une des *courbes de niveau* (par exemple l'isovaleur 0) d'une fonction régulière (au moins lipschitzienne) $\phi(x,t)$, de $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$. Autrement dit, à un instant t,

$$\Gamma(t) = \{x \in \mathbb{R}^2 \text{ t.q. } \phi(x,t) = 0\} \tag{2.1}$$

L'interface est donc implicitement définie par ϕ, qui est appelée la *fonction Level Set*. On a, par exemple :

$$\begin{cases} \phi(x,t) < 0 & \text{pour } x \in \Omega_1 \\ \phi(x,t) > 0 & \text{pour } x \in \overline{\Omega_1} \\ \phi(x,t) = 0 & \text{pour } x \in \Gamma(t) = \partial\Omega_1 \end{cases} \tag{2.2}$$

comme l'illustre la Figure 2.2, où une interface Γ, circulaire, est considérée.

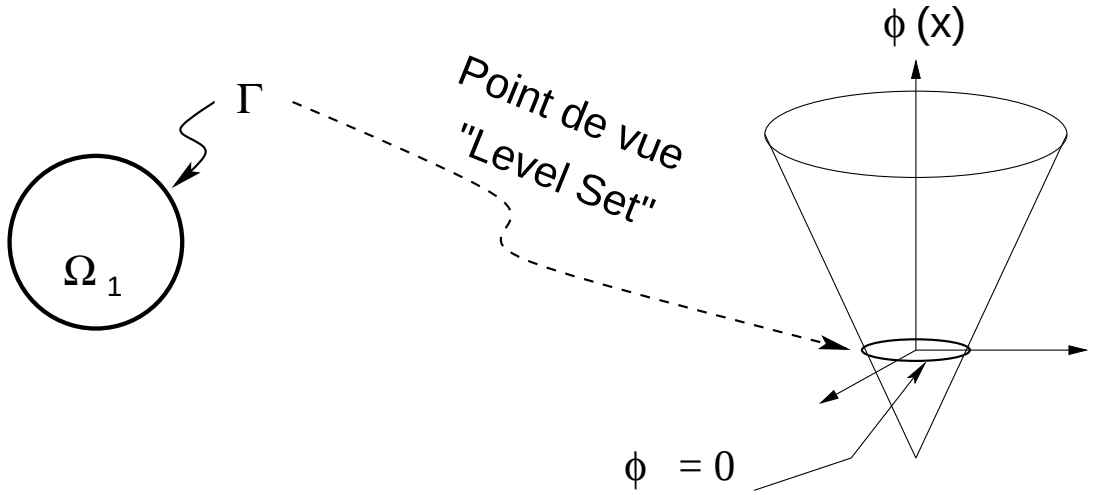


FIG. 2.2 – Une fonction Level Set ϕ définissant implicitement une interface Γ circulaire

D'autre part, le déplacement de l'interface est obtenu en déterminant l'évolution en temps de la fonction Level Set. En d'autres termes, au lieu de s'attacher au mouvement des points de Γ, la méthode Level Set consiste à faire évoluer la surface globale que constitue ϕ. Dès lors, l'interface est déterminée à un instant ultérieur, par simple localisation de l'ensemble $\Gamma(t)$ pour lequel ϕ est nulle. C'est ainsi que ce type d'approche est qualifié de *capture d'interface* ; par opposition aux méthodes de *front tracking* qui, elles, sont basées sur un suivi pointilleux

des éléments de Γ. Par ailleurs, le caractère global de cette formulation est intéressant d'un point de vue du calcul numérique car les changements topologiques, comme la séparation ou la fusion, sont définis de manière intrinsèque et ne nécessitent pas de traitement fastidieux. Nous en donnerons un exemple dans la suite.

Il convient maintenant de faire entrer en scène la *vitesse* qui est à l'origine du *mouvement de l'interface*. Ce déplacement est en fait naturellement déterminé en transportant ϕ grâce au champ $\mathbf{v}$. Pour cela, on utilise l'équation de transport canonique :

$$\phi_t + \mathbf{v}.\nabla\phi = 0 \tag{2.3}$$

qui, dans ce contexte, se voit rebaptisée : *équation Level Set*. Notons que la trace de $\mathbf{v}$ sur $\Gamma(t)$ doit naturellement correspondre à la vitesse désirée pour mouvoir l'interface mais qu'ailleurs, cette vitesse peut être quelconque. Ce point fera aussi l'objet d'une discussion ultérieurement.

La Figure 2.3 illustre le processus de l'évolution d'une interface initiale Γ_0, circulaire de rayon 1, sous l'action d'un champ de vitesse radial unitaire. La fonction Level Set initiale est, comme c'est fréquemment le cas dans la littérature, une fonction distance signée à l'interface, *i.e.* :

$$\begin{cases} \phi(x,t) = -d(x) & \text{pour } x \in \Omega_1 \\ \phi(x,t) = d(x) & \text{pour } x \in \overline{\Omega_1} \\ \phi(x,t) = 0 & \text{pour } x \in \Gamma(t) = \partial\Omega_1 \end{cases} \tag{2.4}$$

où $d : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^+$ est la distance à l'interface. Typiquement, dans la Figure 2.3, $\phi_0(x_1, x_2) = \sqrt{{x_1}^2 + {x_2}^2} - 1$ vérifie bien (2.4) et définit implicitement Γ_0. Nous reparlerons de ces fonctions distances plus loin. Sous l'action de l'équation Level Set, le cône ainsi défini par ϕ évolue en induisant la croissance isotrope du cercle initial.

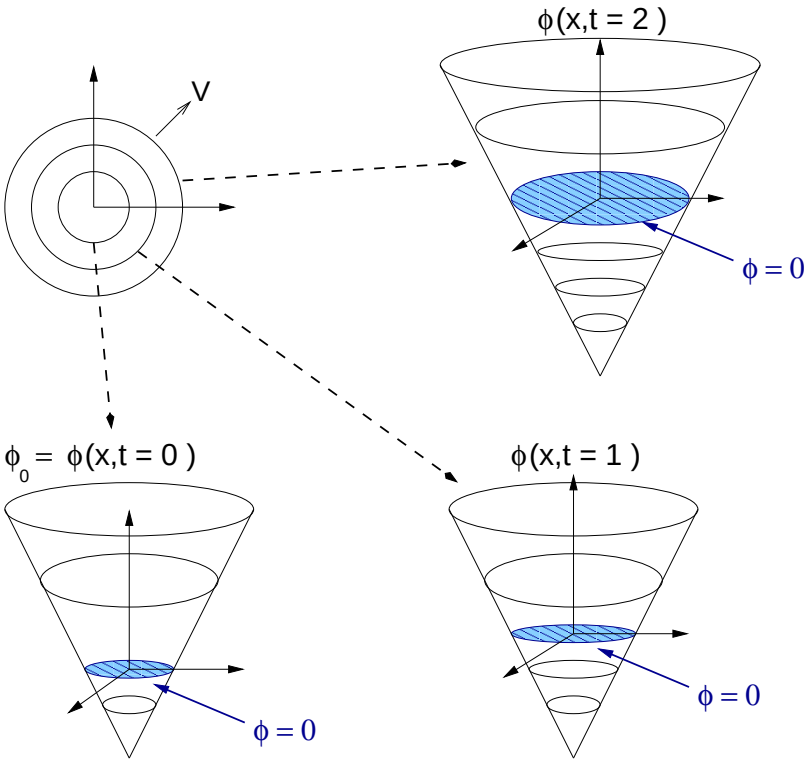


FIG. 2.3 – Evolution d'une interface par la méthode Level Set

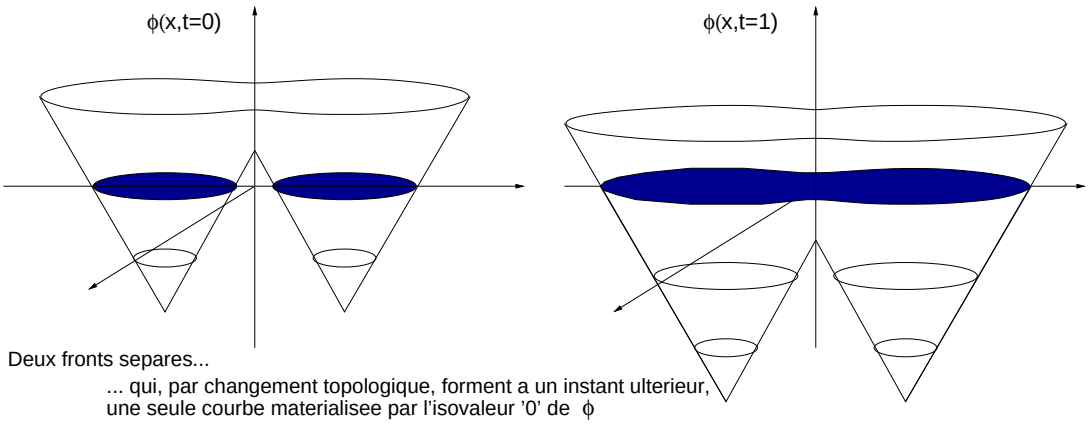


FIG. 2.4 – Changement topologique et méthode Level Set

Prolongeant cet exemple, on ajoute un autre cercle constituant ainsi une interface Γ_0 à deux composantes connexes et permettant d'illustrer la commodité intrinsèque de la méthode lorsqu'il s'agit de capturer des changements topologiques (*cf.* Figure 2.4). Les deux cercles croissent comme dans l'exemple précédent, ce qui conduit à leur fusion. En n'utilisant que l'équation Level Set pour mouvoir l'interface, on constate que le recollement de ces deux "bulles" se fait de manière directe. On évite ainsi des traitement numériques qui peuvent se révéler d'autant plus fastidieux que la dimension étudiée est grande, comme on l'a évoqué, dans le chapitre précédent, pour les méthodes *front tracking*.

De manière plus générale, la méthode s'étend identiquement à la dimension $n \geq 3$. Dans ce cas, l'interface Γ, de codimension un, vit dans $\mathbb{R}^n$. Sa représentation implicite en fait l'une des isovaleurs d'une fonction ϕ régulière (au moins lipschitzienne) $\phi(x,t)$, de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$, telle que l'interface soit l'iso-0 de ϕ i.e. $\Gamma(t) = \{x \in \mathbb{R}^n \text{ t.q. } \phi(x,t) = 0\}$. Naturellement, la ligne de niveau est de dimension $n-1$.

L'utilisation de la représentation implicite d'une interface et de l'équation de transport pour en déduire son évolution est bien connue dans le domaine de la combustion puisque ce principe a été proposé par Markstein dans un ouvrage de 1964 [103]. Il s'agissait ici de suivre la propagation d'un front de flamme. Plus récemment, Dervieux et Thomasset ont eux aussi utilisé la même philosophie pour simuler des écoulements multifluides avec une approche par éléments finis dans leurs publications [41] et [42] en 1979 puis 1981. S'il est probable que le concept des lignes de niveau ait été utilisé dans d'autres travaux dédiés au suivi d'interfaces, il est aussi trés clair que *tant* la formalisation de cette problématique dans le cadre des équations de Hamilton-Jacobi afin de résoudre numériquement le mouvement du front, *que* les outils développés ultérieurement pour améliorer la méthode Level Set *et* les domaines d'applications trés variés abordés ont été majoritairement menés, au cours des années 1990, dans les sillages d'Osher, Sethian et leurs collègues liés aux équipes californiennes. A l'heure actuelle, des chercheurs de tous les continents se concentrent sur cette approche pour en proposer des mises en oeuvre optimisées (précision, rapidité) ou de nouvelles applications, faisant ainsi de la méthode Level Set un champ académique actif.

Dans la suite de ce chapitre, nous allons décrire les outils associés à cette méthode de capture d'interface.

2.2 Outils

Comme nous l'avons vu précédemment, l'interface est capturée implicitement par la fonction ϕ définie globalement. Ceci constitue l'un des désavantages de la méthode puisque, ayant rajouté une dimension, on a augmenté la taille du problème à résoudre. Cependant, outre la gestion facilitée des changements topologiques évoquée auparavant, cette formulation donne un accès rapide ou permet de calculer simplement les quantités nécessaires au processus de suivi de front.

Mais avant de détailler cela, il convient de discuter la nature de la fonction Level Set. La seule caractéristique importante évoquée jusqu'à maintenant est que l'une de ses courbes de niveau, *e.g.* l'iso-0, correspond à l'interface étudiée. Dès lors, on peut se demander quelles valeurs doit prendre ϕ en dehors de Γ. Une idée naturelle consiste à valoriser au maximum le fait que l'on ait ajouté une dimension ; en d'autres termes, il faut placer un maximum d'informations utiles au suivi d'interface dans l' "espace de stockage" que constitue ϕ. Il en découle alors une autre question :

quelles informations globales sur ϕ vont permettre d'améliorer la qualité du suivi d'interface ?

Parmi les considérations qui peuvent apporter des réponses à cette interrogation, nous en proposerons deux qui conduisent aux principes de l'école californienne et sur lesquelles se basent les travaux de ce manuscrit :

- Quel est le champ d'application du suivi d'interface ? Ce qui revient à déterminer les quantités, associées à l'interface, qui vont jouer un rôle prépondérant dans sa dynamique. Un bon traitement de ces termes jouera donc dans la qualité du suivi de front.
- Comment conserver, dans un cadre discret, les avantages intrinsèques possédés par la méthode dans le domaine continu ? Puisque notre objectif est de simuler numériquement l'évolution d'interfaces.

En fait, cela revient à être précis dans la résolution de l'équation de transport (2.3) et dans le calcul des quantités associées à l'interface. Dans ces tâches, comme nous allons le voir dans la suite, les gradients de ϕ interviennent, si bien que les deux considérations ci-dessus peuvent se synthétiser en :

dans un cadre discret, les gradients de ϕ doivent pouvoir être calculés précisement.

Pour réaliser ce critère, la majorité de la communauté Level Set a convergé vers un choix de ϕ donnée par la distance signée.

Définition 2.2.1 *La distance signée D à l'interface Γ est telle que :*

$$D(x) = \begin{cases} -\min\limits_{\forall x_\Gamma \in \Gamma} |x - x_\Gamma| & si\ x \in \Omega_1 \\ \min\limits_{\forall x_\Gamma \in \Gamma} |x - x_\Gamma| & si\ x \in \overline{\Omega_1} \end{cases} \tag{2.5}$$

Remarquons qu'il ne tient qu'au désir de chacun de définir D en inversant les signes suivant que l'on se trouve dans ou hors de Ω_1.
Une propriété intéressante de la fonction distance signée est que :

$$|\nabla D| = 1 \tag{2.6}$$

sauf aux points qui sont équidistants d'au moins deux points de Γ. Numériquement, il faut prendre garde à ces singularités mais globalement, grâce à leur régularité, les distances signées

sont bien adaptées à la différenciation discrète et permettent d'atteindre des ordres de précision élevés.

Nous allons maintenant faire l'inventaire des informations que l'on peut tirer de la fonction Level Set.

L'une des observations les plus évidentes est que le signe de $\phi(x)$ permet de savoir immédiatement dans quel milieu se trouve le point x.

Ensuite, la normale à l'interface est naturellement donnée par :

$$\mathbf{n} = \left.\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}\right|_{\phi=0} \tag{2.7}$$

et la courbure moyenne de l'interface est définie par :

$$\kappa = \nabla.\left(\left.\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}\right)\right|_{\phi=0} = \nabla.\,\mathbf{n} \tag{2.8}$$

Grâce à ϕ, les quantités n et κ peuvent aussi être déterminées sur tout le domaine considéré. C'est lorsque l'on s'intéresse au passage du continu au discret que le choix de prendre ϕ comme étant une distance signée, se révèle être judicieux : la monotonie de la fonction Level Set au voisinage de l'interface permet de calculer précisement les gradients. Notons cependant qu'il faut toujours avoir en tête d'éventuelles singularités (présentes notamment lors de changements topologiques) qu'il faudra au besoin traiter de manière adéquate et que ϕ ne doit pas être bruitée. En effet, par dérivations successives, les perturbations sur ϕ vont s'amplifier au cours des calculs : une première fois pour la normale, puis une seconde pour la courbure.

De plus, l'intégration d'une quantité q sur le volume défini par Ω_1 s'obtient en calculant :

$$\int_{\mathbb{R}^n} q(x)\,[1 - H(\phi(x))]dx \tag{2.9}$$

où

Définition 2.2.2 *La fonction de Heaviside H est définie par :*

$$H(\phi) = \begin{cases} 0 & si\ \phi < 0 \\ 1/2 & si\ \phi = 0 \\ 1 & si\ \phi > 0 \end{cases} \tag{2.10}$$

On utilise à profit la fonction de Dirac δ, dérivée de H au sens des distributions

$$\delta(\phi) = \nabla H(\phi).\mathbf{n} \tag{2.11}$$

pour obtenir l'intégrale de la quantité q, sur la surface définie par Γ, en calculant :

$$\int_{\mathbb{R}^n} q(x)\delta(\phi(x))dx \tag{2.12}$$

La transposition de ce formalisme au domaine discret nécessite l'adaptation des fonctions de Heaviside et de Dirac. En effet, il apparaît clairement que, δ étant nulle presque partout, un maillage discrétisant l'espace a très peu de chance de capter l'interface. Aussi la communauté Level Set utilise-t-elle les versions "lissées" suivantes.

Définition 2.2.3 *La fonction de Heaviside lissée H_ε est définie par :*

$$H_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} 0 & si \quad \phi < -\varepsilon \\ \frac{1}{2}[1 + \frac{\phi}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi}\sin(\pi\phi/\varepsilon)] & si \quad |\phi| \leq \varepsilon \\ 1 & si \quad \phi > \varepsilon \end{cases} \tag{2.13}$$

où ε est un paramètre qui détermine la largeur sur laquelle s'étale l'interface, d'un point de vu numérique. Typiquement, si Δx est le pas d'espace, $\varepsilon = \frac{3}{2}\Delta x$. Dans ce cas, en considérant que ϕ est une distance signée, la largeur de l'interface est de trois mailles.

Définition 2.2.4 *La fonction de Dirac lissée δ_ε est définie par :*

$$\delta_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} 0 & si \quad \phi < -\varepsilon \\ \frac{1}{2}[\frac{1}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon}\cos(\pi\phi/\varepsilon)] & si \quad |\phi| \leq \varepsilon \\ 0 & si \quad \phi > \varepsilon \end{cases} \tag{2.14}$$

Les versions lissées approchent les versions originales à l'ordre un. Il en est donc de même pour l'approximation numérique des intégrales (2.9) et (2.12), indépendamment de la précision de la méthode d'intégration.

La justification de ce lissage des interfaces ponctuelles est décrite dans [183], en suivant une approche introduite par Peskin [119] (que nous avons déjà évoqué au chapitre précédent). Elle consiste à considérer δ comme la limite, d'une fonction régulière, quand un paramètre caractérisant sa régularité tend vers 0. De même que les différences finies approximant une dérivée sont obtenues en tronquant la limite avec un pas Δx, la fonction de Dirac est approchée en prenant un paramètre régularisant ε égal à une valeur petite mais strictement positive (*cf.* Figure 2.5).

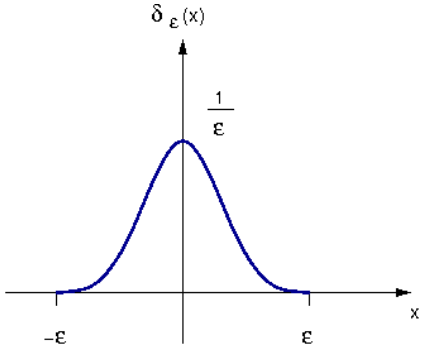


FIG. 2.5 – Représentation discrète du Dirac, à l'aide d'une version lissée, δ_ε qui tend vers δ quand ε tend vers 0.

2.3 Terminologie Level Set

Après avoir détaillé la forme de la fonction capturant l'interface et quelques informations qui peuvent en être extraites facilement, nous allons présenter les ingrédients qui sont utilisés

dans les approches Level Set récentes. En effet, suite au travail d'Osher et Sethian [116], diverses techniques furent introduites pour améliorer la méthode.

Revenons, tout d'abord sur l'équation (2.3) qui permet de mouvoir l'interface. En remarquant d'une part que la vitesse $\mathbf{v}$ peut se décomposer suivant la normale $\mathbf{n}$ et la tangente $\mathbf{n}^{\perp}$ à l'interface :

$$\mathbf{v} = v_n\mathbf{n} + v_{n^{\perp}}\mathbf{n}^{\perp} \tag{2.15}$$

et d'autre part que $\mathbf{n}^{\perp}.\nabla\phi = 0$ puisque $\mathbf{n}$ et $\nabla\phi$ sont colinéaires, on en déduit que l'équation Level Set se reformule en :

$$\phi_t + v_n\mathbf{n}.\nabla\phi = 0 \tag{2.16}$$

De plus, d'un point de vue formel, par définition de la normale :

$$\mathbf{n}.\nabla\phi = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}.\nabla\phi = |\nabla\phi|, \tag{2.17}$$

on déduit la deuxième version de l'équation Level Set aussi utilisée par la communauté :

$$\phi_t + v_n|\nabla\phi| = 0 \tag{2.18}$$

Cette formulation ne fait intervenir que la composante de la vitesse dans la direction normale à l'interface, aussi appelée *vitesse normale*. En pratique, suivant les applications, on utilisera (2.3), bien adaptée aux cas où la vitesse est soumise à des influences extérieures à l'interface, ou (2.18) lorsque le modèle fournit uniquement la vitesse normale à l'interface. Un champ de vitesse calculé par un modèle de Navier-Stokes bifluide est un exemple typique de champ "externe" alors qu'une vitesse proportionnelle à la courbure de l'interface correspond à un champ "interne".

Nous avons vu au chapitre précédent que, pour la simulation d'écoulements incompressibles, l'un des enjeux du suivi d'interface est de conserver la masse des fluides en présence. Depuis le travail de Sussman *et al.* [169], l'attention des recherches s'est portée sur l'amélioration des propriétés de conservation de masse qui font généralement défaut à la méthode Level Set.

La première approche à laquelle on pense intuitivement pour pallier ce probléme consiste à mettre en oeuvre des méthodes précises pour résoudre numériquement l'équation de transport sur ϕ. A cette fin, des schémas de discrétisation d'ordre élevé peuvent être utilisés. La proximité d'Osher avec la méthode Level Set fait qu'une majeure partie de la communauté utilise des schémas Essentiellement Non Oscillants (ENO) et Weighted ENO (WENO). Le chapitre 3 sera dédié à la description de ces *schémas ENO et WENO* pour la discrétisation en espace ainsi qu'à celle des schémas *TVD Runge-Kutta* pour la discrétisation en temps. Notons que, récemment, d'autres approches numériques usant des fonctions Level Set discontinues et de schémas de transport conservant la masse ont été proposées. A l'image des travaux d'Olsson et Kreiss [114] ainsi que de Marchandise *et al.* [102], dont les résultats sont d'une remarquable qualité.

Un autre ingrédient d'usage fréquent est l'*équation de redistanciation*. Elle a été introduite pour calculer, à partir d'une donnée initiale ϕ_0, définissant une interface Γ et telle que $|\nabla\phi_0| \neq 1$, une fonction ϕ capturant la même interface mais telle que $|\nabla\phi| = 1$. En effet, il a été montré que résoudre l'équation Level Set avec une fonction distance signée conduit à une meilleure précision des résultats, tant du point de vue de la conservation de la masse que du calcul de la normale et de la courbure ; cela grâce au fait que ces fonctions ne présentent pas de gradient

trop fort ou trop faible et possèdent des lignes de niveau parallèles. La nécessité de pouvoir "redistancier" les fonctions capturant les interfaces est à l'origine de plusieurs méthodes que nous présenterons plus en détails au chapitre 4.

Il convient aussi de discuter les sens que peut recouvrir la vitesse dans tout le domaine de définition de ϕ. En effet, nous avons déja mentionné auparavant que la vitesse $\mathbf{v}$ peut avoir une valeur quelconque en tout point hors de l'interface. Cependant, une définition judicieuse de la vitesse en dehors de Γ peut permettre d'améliorer la précision de la méthode Level Set. Ainsi, dans [193], il ressort qu'une distance signée tend à le rester lorsqu'elle est transportée avec une vitesse étendue, dans tout le domaine, comme suit : en tout point x du domaine de définition de ϕ, on affecte à $v(x)$ la valeur $v(x_P)$ de la vitesse du point x_P de l'interface tel que $x_P = \min_{x_\Gamma \in \Gamma} |x - x_\Gamma|$. Cette approche peut conduire à des vitesses indéfinies, puisque les trajectoires normales à l'interface peuvent se croiser, mais elle a été utilisée avec profit dans plusieurs travaux dont [6] et [25].
Lorsque le champ de vitesse utilisé pour transporter ϕ a un sens global, comme c'est le cas par exemple lorsqu'il provient de la résolution d'un problème de mécanique des milieux continus, il arrive que l'on utilise ce champ dans l'équation Level Set. Cependant, un tel tranport va fort probablement compresser ou étirer les lignes de niveau de ϕ. Pour remédier à cela, on peut alors redistancier : on soigne en quelque sorte le malade *a posteriori*. L'un des moyens d'action en amont, pour conserver la distance signée, est donc d'utiliser l'extension des vitesses pour "préparer" un champ de vitesse qui ne va pas déformer les lignes de niveau, au moins dans un voisinage de l'interface.
Dans d'autres applications, où la vitesse provient d'un calcul qui ne dépend que de l'interface et ne donne qu'une valeur en des points qui lui appartiennent, il est alors vital d'affecter une vitesse en dehors de l'interface. En effet, pour réaliser un calcul numérique précis, il faut que la vitesse soit définie de manière consistante sur plusieurs mailles autour de l'interface (par exemple deux ou trois, voire plus suivant le stencil de discrétisation), de manière à ce que la résolution de l'équation de transport induise un déplacement précis de Γ. Dans ces cas, les *procédures d'extension des vitesses depuis l'interface* sont alors indispensables.
Dans cette thèse, nous n'avons pas étudié en détail les effets bénéfiques que l'on pouvait tirer de l'extension des vitesses suivant la direction normale. Cela peut constituer l'une des voies de prospection ultérieure pour ces travaux. Notons par ailleurs que les problèmes de résolution des équations liées à ces extensions sont identiques à ceux que l'on rencontre lorsque l'on veut résoudre l'équation de redistanciation. Aussi, reparlerons nous brièvement de l'extension des vitesses au chapitre 4.

Les problématiques de conservation de masse ont donc conduit à l'introduction des méthodes mentionnées ci-dessus et dont le fil conducteur n'est autre que l'augmentation de la précision via :

- l'utilisation des schémas d'ordre élevé qui se nourrit mutuellement avec ...
- ... la construction des fonctions distances permettant d'atteindre numériquement ces ordres lors des simulations ;
- des méthodes pour conserver et/ou déterminer des fonctions distances à partir de n'importe quel objet définissant implicitement une interface.

D'autres technologies sont aussi apparues dans la communauté Level Set pour pallier l'un de ses autres défauts, à savoir l'augmentation de la taille du problème. Parallèlement à la précision, les chercheurs se sont donc attaqués à l'optimisation de la rapidité du temps de calcul.

La diminution du temps CPU a bien sûr été abordée grâce à la parallélisation des algorithmes de la méthode. Sethian en mentionne le développement pour des Connection Machines

CM-2 et CM-5 vers 1989, dans son ouvrage [145]. En outre, les premières utilisations de *raffinement de maillage adaptatif* (ou *AMR*, en anglais), dans un contexte Level Set, semblent avoir été menées par Milne, au cours de son doctorat à Berkeley vers 1995. Pour ce faire, il s'inspira des travaux précurseurs de Berger, Collela et Oliger [15, 14] en AMR pour les lois de conservation hyperboliques. Plus récemment Sussman *et al.* [165] ont présenté une approche AMR pour des écoulements bifluides incompressibles. Il s'agit toujours, à l'heure actuelle, d'un champ actif de recherches, notamment à l'INRIA (projets Gamma et Smash).
On peut noter que les méthodes AMR sont bien adaptées aux écoulements présentant des chocs puisqu'on veut qu'il y ait le moins possible de mailles adjacentes dont la résolution est différente ; ceci afin d'éviter des réflexions de chocs artificielles. Cependant, pour d'autres situations, ces empiècements uniformes de grilles plus fines rajoutent parfois plus d'informations que nécessaires. C'est dans le but d'optimiser le raffinement que les approches octree (en 3D) et quadtree (en 2D) ont été introduites. En Level Set, Strain fût l'un des premiers à présenter l'utilisation de quadtree dans [163, 161]. L'extension en 3D fût ensuite réalisée par Losasso, Gibou et Fedkiw et appliquée à la simulation de surfaces libres ainsi qu'à des volutes de fumée autour d'obstacles solides [98] (*cf.* Figure 2.6). Plus générales que les méthodes AMR, les approches utilisant les structures de données de type octree demandent en contrepartie une expertise pointue en terme d'algorithmie et d'implémentation pour disposer de codes réellement efficaces.

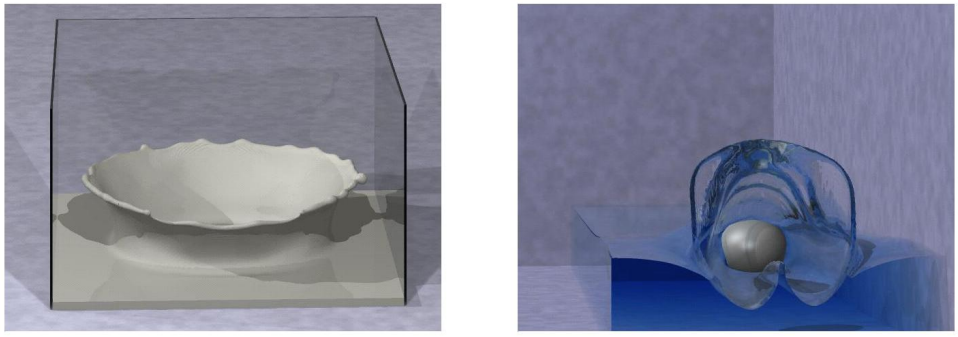


FIG. 2.6 – Simulation Level Set avec des octrees (extraites de [56] et détaillées dans [98]) : à gauche, formation d'un couronne de lait aprés l'impact d'une sphère ; à droite, une ellipse propulsée juste sous la surface libre. Grâce à cette approche de raffinement du maillage, il est possible de bien capter le développement des films minces, avec des temps de calcul raisonnables.

Comme on l'a vu, la fonction ϕ stocke toute une famille de courbes de niveau et, dans la plupart des applications, une seule nous intéresse pour suivre l'interface. Une autre approche économe fut alors introduite par Chopp dans [27] : elle consiste à ne manipuler qu'une partie de la fonction Level Set, à savoir une bande englobant l'interface et suffisamment large pour pouvoir réaliser les calculs. Cette *méthode* dite "*Narrow Band*" permet de résoudre les équations sur un domaine restreint comparativement à une approche standard. Elle n'est pas triviale à implémenter, peut se révéler aussi complexe algorithmiquement que les méthodes de suivi explicite mais conserve l'avantage de la gestion intrinsèque des changements topologiques et s'étend naturellement aux dimensions supérieures. Adalsteinsson et Sethian en proposent une analyse détaillée dans [6].

Enfin, pour compléter ce tour d'horizon, il convient de mentionner la classe des *méthodes Fast*

Marching. Elles permettent de calculer des distances signées de manière rapide en utilisant des algorithmes qui se basent sur la nature hyperbolique des équations à résoudre pour redistancier et des structures de données permettant des tris optimaux. Nous les détaillerons au chapitre 4.

On dispose maintenant de la terminologie générale actuelle des techniques directement associées à la méthode Level Set.

2.4 Variantes de la méthode

Dans le but de pallier les pertes de masses, différents couplages ont été réalisés entre l'approche Level Set et d'autres méthodes évoquées au chapitre 1.

L'un des intérêts de la méthode Level Set est qu'elle est capable de capter naturellement les solutions de viscosité des équations de Hamilton-Jacobi. Ce qui n'est pas le cas des méthodes particulaires qui réalisent un suivi lagrangien : lorsque des chocs évoluent, il est nécessaire de mettre en oeuvre des procédures qui ajoutent ou enlèvent de l'information. Outre le fait qu'il ne soit pas trivial d'injecter une information qui a un sens, la mise en place de telles procédures en dimension supérieure à deux devient un réel challenge. En Level Set, ces problèmes sont gérés naturellement en s'appuyant sur le vaste héritage des travaux sur les lois de conservation hyperboliques.
Alternativement, les pertes de masse dues à la méthode Level Set sont liées au fait que, dans les régions où l'écoulement est sous-résolu, elle n'est pas capable de déterminer si les caractéristiques fusionnent, divergent ou restent parallèles. Il en résulte des solutions pour lequelles des caractéristiques sont abusivement supprimées alors qu'elles auraient dû fusionner. En revanche, grâce à la préservation permanente des caractéristiques matérielles, les méthodes lagrangiennes arrivent à conserver précisément la masse, sans avoir à réaliser un traitement particulier.
Une méthode combinant les approches Level Set et particulaire a été proposée dans [45], pour des écoulements multifluides. L'idée consiste à utiliser une fonction Level Set et un ensemble de particules ensemencées autour de l'interface qui vont permettre de conserver toute l'information des caractéristiques. Essentiellement, les particules sont transportées comme des traceurs passifs dans l'écoulement et lorsqu'elles traversent l'interface, cela signifie que des informations ont été supprimées : la fonction Level Set est alors corrigée en exploitant les renseignements donnés par ces particules ayant traversé. Les résultats obtenus par cette *méthode Particle Level Set* présentent une amélioration significative de la conservation de la masse.

Un autre type d'hybridisation entre les méthodes Level Set et VOF a été détaillé par Sussman *et al.* [168] [164] ainsi que par Van der Pijl *et al.* [184].
Dans [168] est introduite la *méthode CLSVOF* (pour Coupled Level Set / Volume-of-Fluid). L'écoulement est ici calculé en utilisant les bonnes propriétés de la fonction Level Set relativement à la détermination des normales et des courbures. L'interface est ensuite transportée en utilisant une approche de type VOF-PLIC permettant ainsi d'atteindre une bonne conservation de la masse.
L'une des motivations des auteurs de [184] est de s'affranchir de la difficile reconstruction d'interface nécessaire dans l'approche VOF. Ils dérivèrent alors la *méthode MCLS* (pour Mass-Conserving Level Set). Contrairement à la méthode CLSVOF, seule subsiste la fraction volumique, notée Ψ, associée au formalisme VOF. En supposant que les interfaces sont linéaires

par morceaux, les auteurs écrivent une relation liant Ψ à ϕ. Ils disposent ainsi d'un moyen plus simple de transporter Ψ et retrouver ϕ, comparativement aux procédures PLIC, tout en réalisant une bonne conservation de la masse.

Ces méthodes hybrides ont bien évidemment un coût d'implémentation supplémentaire qui n'est pas négligeable, vis à vis de l'approche Level Set classique.

Dans [193], Zhao *et al.* ont développé une *approche Level Set variationnelle* pour suivre des interfaces dans des milieux multiphasiques. L'idée consiste à utiliser une fonction Level Set pour caractériser chaque phase et à associer une fonctionnelle d'énergie aux régions ainsi définies. Le problème revient alors à minimiser une énergie sous contraintes. Pour cela, la méthode de projection de gradient ainsi que les outils associés aux fonctions Level Set sont utilisés. Cette approche variationnelle a notamment été appliquée à l'étude de gouttes en deux et trois dimensions [194] mais aussi en traitement d'images.

Il existe par ailleurs une approche Level Set pour étudier l'*évolution d'objet de codimension deux*. Rappelons tout d'abord que dans le cadre classique, les interfaces considérées sont de codimension un : comme des points en 1D, des courbes en 2D ou des surfaces en 3D. La référence [21] étend la méthode à la capture d'objet de codimension 2, comme par exemple une courbe dans un espace de dimension trois. Pour cela, ces objets sont caractérisés comme étant l'intersection des isovaleurs 0 de deux fonctions Level Set. Dans le même esprit, il est aussi possible de considérer l'évolution de courbes (resp. de surfaces) non fermées en 2D (resp. en 3D) : en effet, dans ces cas, non gérés par la méthode standard, il faut prendre en compte le fait que les extrémités de ces objets non fermés sont des ensembles de codimension deux. Le lecteur intéressé pourra se référer au travail de Smereka [154].

Ainsi, au travers de ce chapitre, nous avons présenté le principe de la méthode Level Set et les outils qui lui sont directement rattachés. En outre, nous avons pu prendre conscience, après une rapide revue, que cette philosophie s'est développée tant grâce au couplage avec d'autres méthodes qu'à son métissage avec d'autres formulations.
Dans les chapitres qui suivent, nous allons rentrer plus en détails dans la mise en oeuvre de la méthode Level Set, en commençant par la discrétisation des équations de Hamilton-Jacobi.

Chapitre 3

Discrétisations des équations de Hamilton-Jacobi

Dans le chapitre précédent, nous avons vu que la méthode *Level Set* dispose de plusieurs outils que sont les équations de transport, de redistanciation, d'extension normale ... Si l'on considère des cas où n'interviennent que des dérivées d'ordre un de l'inconnue (on exclut donc ici, par exemple, les formulations *Level Set* où la vitesse de l'interface dépend de la courbure), alors ces équations appartiennent à la classe plus large des *équations de Hamilton-Jacobi* dont la forme générale peut s'écrire :

$$\begin{cases} \phi_t + \mathcal{H}\left(x, t, \phi, \nabla\phi\right) = 0 \quad \forall x \in \Omega \; \forall t > 0 \\ \phi(x, 0) = \phi_0 \end{cases} \tag{3.1}$$

où $\mathcal{H}$ se nomme le *Hamiltonien* et Ω est muni de conditions aux limites *ad hoc*.

Par exemple, l'équation de transport - induite par un champ de vitesse extérieur $\mathbf{v}$ - correspond à $\mathcal{H}\left(\nabla\phi\right) = \mathbf{v}.\nabla\phi$. Quant à l'équation *Level Set* générique, on a $\mathcal{H}\left(\nabla\phi\right) = V_n|\nabla\phi|$ où la vitesse normale V_n peut dépendre de x, t ou même $\nabla\phi\,/\,|\nabla\phi|$ (*e.g.* redistanciation).

Ce type d'équation est impliqué dans de nombreuses applications et a fait l'objet d'une kyrielle de recherches tant théoriques que numériques. Il est désormais classiquement connu que les solutions de ces équations peuvent développer des discontinuités, même si la donnée initiale est hautement régulière. Par ailleurs, dans le cas général, il n'y a pas unicité de la solution. Crandall et Lions introduisirent la fructueuse notion de solution dite "*de viscosité*" dans [37] (1983) : avec de faibles hypothèses sur le Hamiltonien et la donnée initiale, ils prouvèrent l'existence et l'unicité d'une telle solution au problème (3.1). Ils amorcèrent aussi les premiers travaux numériques [38] (1984) pour calculer les solutions visqueuses en construisant la classe des schémas *monotones* pour une version simplifiée de (3.1) :

$$\begin{cases} \phi_t + \mathcal{H}\left(\nabla\phi\right) = 0 \quad \forall x \in \Omega \; \forall t > 0 \\ \phi(x, 0) = \phi_0 \end{cases} \tag{3.2}$$

Bien que ces schémas convergents ne soient que d'ordre un (donc très dissipatifs), ils peuvent servir de brique de construction aux schémas d'ordre plus élevé.

Comme nous l'avons dit, il existe de multiples méthodes pour discrétiser les équations de Hamilton-Jacobi sur des maillages structurés ou non (voir par exemple les ouvrages de LeVeque [95], Toro [176], Guillard et Abgrall [65]). Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser plus particulièrement à la montée en ordre avec des *schémas ENO* et *WENO* pour la discrétisation en espace sur des maillages cartésiens ainsi qu'avec des schémas *TVD - Runge-Kutta* pour la discrétisation en temps.

3.1 Discrétisations (W)ENO en espace

A titre d'exemple, considérons un instant l'équation de transport 1D :

$$\phi_t + u\phi_x = 0 \tag{3.3}$$

Nous voulons discrétiser cette équation sur une grille dont le type est présenté sur la Figure 3.1.

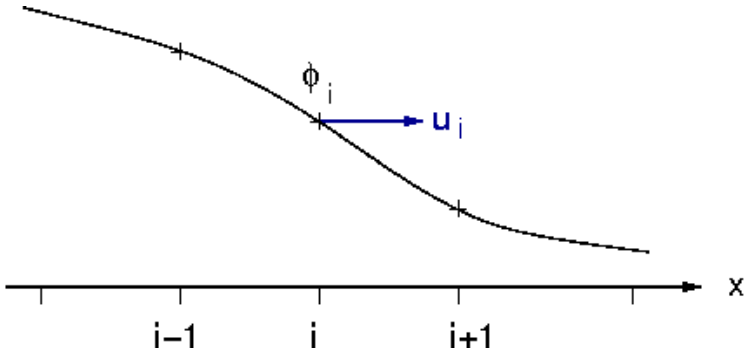


FIG. 3.1 – Maillage 1D : l'inconnue ϕ et la vitesse u sont données aux points i, séparés de la distance Δx du pas de discrétisation en espace.

Une idée consiste à adopter une approche **upwind** pour le calcul des dérivées en espace : en tout point (x_i) de la grille en espace, le terme ϕ_x est calculé de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{lll} \text{si } u_i > 0 & \text{alors} & \phi_x = \phi_x^- \\ \text{si } u_i < 0 & \text{alors} & \phi_x = \phi_x^+ \\ \text{si } u_i = 0 & \text{alors} & \text{aucun choix n'est utile} \end{array} \right. \tag{3.4}$$

Pour cela, il faut construire les discrétisations de ϕ_x à gauche et à droite que l'on note respectivement ϕ_x^+ et ϕ_x^-.

Les schémas ENO et WENO permettent de monter en ordre pour l'approximation de ϕ_x^+ et ϕ_x^-.

3.1.1 schémas ENO

Les schémas Essentiellement Non Oscillant (ENO) ont été développés initialement par Harten et Osher dans [72] (1985) puis par Harten, Engquist, Osher et Chakravarty dans [71] (1986), pour la résolution numérique des lois de conservation. Il s'agit de construire une interpolation polynomiale des données, qualifiée d' "essentiellement non oscillante". L'idée consiste à calculer le flux au bord des cellules à l'aide de telles interpolations sur le stencil où le polynôme est le plus régulier, de manière à réaliser un ordre élevé de précision et à éviter les oscillations (de type phénomène de Gibbs) près des chocs. Cette première version des schémas ENO considère des moyennes par cellules et nécessite une reconstruction pour obtenir les valeurs ponctuelles. Cette reconstruction est fastidieuse et coûteuse en calcul lorsque l'on étend la méthode aux problèmes à plusieurs dimensions. Une amélioration a ensuite été proposée par Shu et Osher dans le diptyque [151] - [152] (1988 puis 1989) pour simplifier ces schémas. Cette version propose de reconstruire directement les flux numériques à l'aide de la méthode

des différences divisées appliquée aux points du maillage.

Les schémas ENO sont robustes et d'ordre élevé uniformément juste avant le choc. On peut cependant noter deux faiblesses. Tout d'abord, des erreurs d'arrondis au voisinage des zéros de la solution ou de ses dérivées peuvent induire des changements brutaux dans le choix libre des stencils candidats à l'approximation la plus douce. Ceci peut réduire la précision de ces schémas dans les parties régulières pour certaines solutions [131] (1990). On peut pallier ce problème grâce à l'ajout de certains paramètres (seuillage ...) dans l'étape du choix du stencil de manière à ce qu'il soit stable dans ces régions éloignées des discontinuités [150] (1990).

L'application des méthodes ENO aux équations de Hamilton-Jacobi a été introduite par Osher et Sethian dans [116] (1988) qui ont remarqué que, en dimension un, les lois de conservation sont liées aux équations de Hamilton-Jacobi. En effet, si l'on considère l'équation scalaire :

$$\phi_t + \mathcal{H}(\phi_x) = 0 \tag{3.5}$$

puis la dérive, formellement par rapport à x :

$$(\phi_x)_t + \mathcal{H}(\phi_x)_x = 0 \tag{3.6}$$

et que l'on pose $u = \phi_x$, on obtient :

$$(u)_t + \mathcal{H}(u)_x = 0 \tag{3.7}$$

qui n'est rien d'autre qu'une loi de conservation scalaire dont la quantité conservative est u et le flux est $\mathcal{H}(u)$. En d'autres termes, la solution u d'une loi de conservation est la dérivée de la solution ϕ d'une équation de Hamilton-Jacobi. Ce lien entre les deux types d'équations n'est plus vrai pour des équations vectorielles. Cependant, la construction des schémas numériques peut être étendue dimension par dimension à partir du schéma scalaire.
Notons qu'ensuite, Osher et Shu [117] (1991) proposèrent un cadre de travail général pour construire des schémas ENO d'ordre élevé basés sur des flux monotones tels les flux de Lax-Friedrichs, de Roe à entropie fixée ou de Godunov.

Dans ce qui suit, on donne explicitement les algorithmes de calcul de ϕ_x des schémas ENO d'ordre 1, 2 et 3, notés ENO i, i=1,2,3. Dans ces algorithmes, on utilise un indice entier k^1 dans les formules génériques tel que :

$$\left\{ \begin{array}{lll} \text{si } k^1 = i-1 & \text{alors} & \text{le résultat final est } \phi_x^- \\ \text{si } k^1 = i & \text{alors} & \text{le résultat final est } \phi_x^+ \end{array} \right. \tag{3.8}$$

L'espace choisi est bidimensionnel et le maillage considéré est présenté sur la Figure 3.2. On se place en un point (i,j) de la grille en espace et on calcule une approximation de $\phi_x^{+,-}(x_i, y_j)$ à la manière de Shu et Osher [152] (1989). L'idée est de construire le polynôme d'interpolation de la solution le plus régulier possible et de le dériver pour obtenir $\phi_x^{+,-}$. La même technique, appliquée dans la direction j, permet de calculer $\phi_y^{+,-}$. Remarquons que nous avons considéré que les pas de discrétisation en espace sont constants sur tout le maillage, de manière à simplifier la présentation ; cependant, *mutatis mutandis*, les algorithmes qui suivent restent valables sur des maillages écossais.

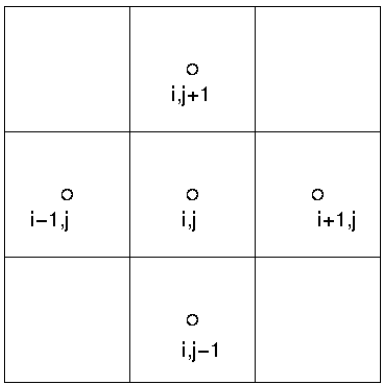


FIG. 3.2 – Maillage 2D : l'inconnue ϕ et la vitesse $\mathbf{v} = (u; v)$ sont données aux points $(i; j)$. On note Δx le pas de discrétisation en espace dans la direction i et Δy celui dans la direction j ; ces pas sont considérés constants sur tout le maillage.

ENO 1

1. $Q^0(x) = \phi_{i,j}$
2. Pour $k^1 = \{i-1, i\}$ calculer :
   (a)
$$Q^1(x) = \frac{\phi_{k^1+1,j} - \phi_{k^1,j}}{\Delta x}(x - x_i)$$
   (b)
$$\left\{ \begin{array}{lll} \text{si } k^1 = i-1 & \text{alors} & \phi_x^- = \frac{dQ^1}{dx} = \frac{\phi_{i,j}-\phi_{i-1,j}}{\Delta x} \\ \text{si } k^1 = i & \text{alors} & \phi_x^+ = \frac{dQ^1}{dx} = \frac{\phi_{i+1,j}-\phi_{i,j}}{\Delta x} \end{array} \right. \tag{3.9}$$

ENO 2

1. $Q^0(x) = \phi_{i,j}$
2. Pour $k^1 = \{i-1, i\}$ calculer :
   (a)
$$Q^1(x) = \frac{\phi_{k^1+1,j} - \phi_{k^1,j}}{\Delta x}(x - x_i)$$
$$d_{i,j}^{(1)} = \frac{dQ^1}{dx}(x) = \frac{\phi_{k^1+1,j} - \phi_{k^1,j}}{\Delta x}$$
   (b) Calculer :
      i.
$$\left\{ \begin{array}{lll} a^1 & = & \frac{\phi_{k^1+1,j}-2\phi_{k^1,j}+\phi_{k^1-1,j}}{2\Delta x^2} \\ b^1 & = & \frac{\phi_{k^1+2,j}-2\phi_{k^1+1,j}+\phi_{k^1,j}}{2\Delta x^2} \end{array} \right. \tag{3.10}$$
      ii.
$$c^1 = \left\{ \begin{array}{ll} a^1 & \text{si } |a^1| \leqslant |b^1| \\ b^1 & \text{sinon} \end{array} \right. \tag{3.11}$$
$$k^2 = \left\{ \begin{array}{ll} k^1 - 1 & \text{si } |a^1| \leqslant |b^1| \\ k^1 & \text{sinon} \end{array} \right. \tag{3.12}$$
      iii.
$$Q^2(x) = Q^1(x) + c^1\left(x^2 - (x_{k^1} + x_{k^1+1})x + x_{k^1}x_{k^1+1}\right)$$
   (c)
$$\frac{dQ^2}{dx}(x_i) = \frac{dQ^1}{dx}(x_i) + c^1(2(i-k^1)-1)\Delta x := d_{i,j}^{(2)}(k^1)$$
$$\left\{ \begin{array}{lll} \text{si } k^1 = i-1 & \text{alors} & \phi_x^- = \frac{dQ^2}{dx}(x_i) = d_{i,j}^{(1)} + c^1\Delta x \\ \text{si } k^1 = i & \text{alors} & \phi_x^+ = \frac{dQ^2}{dx}(x_i) = d_{i,j}^{(1)} - c^1\Delta x \end{array} \right. \tag{3.13}$$

ENO 3

1. $Q^0(x) = \phi_{i,j}$
2. Pour $k^1 = \{i-1, i\}$ calculer :
   (a)
$$Q^1(x) = \frac{\phi_{k^1+1,j} - \phi_{k^1,j}}{\Delta x}(x - x_i)$$

$$\frac{dQ^1}{dx}(x) = Q^{1'}(x) = \frac{\phi_{k^1+1,j} - \phi_{k^1,j}}{\Delta x} := d^{(1)}_{i,j}$$

   (b) Calculer les deux itérations suivantes :
   Premier pas

   i.
$$\left\{ \begin{array}{lcl} a^1 & = & \frac{\phi_{k^1+1,j} - 2\phi_{k^1,j} + \phi_{k^1-1,j}}{2\Delta x^2} \\ b^1 & = & \frac{\phi_{k^1+2,j} - 2\phi_{k^1+1,j} + \phi_{k^1,j}}{2\Delta x^2} \end{array} \right. \tag{3.14}$$

   ii.
$$c^1 = \left\{ \begin{array}{ll} a^1 & \text{si} \quad |a^1| \leqslant |b^1| \\ b^1 & \text{sinon} \end{array} \right. \tag{3.15}$$

$$k^2 = \left\{ \begin{array}{ll} k^1 - 1 & \text{si} \quad |a^1| \leqslant |b^1| \\ k^1 & \text{sinon} \end{array} \right. \tag{3.16}$$

   iii.
$$Q^2(x) = Q^1(x) + c^1 \left(x^2 - (x_{k^1} + x_{k^1+1})x + x_{k^1} x_{k^1+1} \right)$$

$$d^{(2)}_{i,j}(k^1) = d^{(1)}_{i,j} + c^1(2(i - k^1) - 1)\Delta x$$

   Deuxième pas

   i.
$$\left\{ \begin{array}{lcl} a^2 & = & \frac{\phi_{k^2+2,j} - 3\phi_{k^2+1,j} + 3\phi_{k^2,j} - \phi_{k^2-1,j}}{6\Delta x^3} \\ b^2 & = & \frac{\phi_{k^2+3,j} - 3\phi_{k^2+2,j} + 3\phi_{k^2+1,j} - \phi_{k^2,j}}{6\Delta x^3} \end{array} \right. \tag{3.17}$$

   ii.
$$c^2 = \left\{ \begin{array}{ll} a^2 & \text{si} \quad |a^2| \leqslant |b^2| \\ b^2 & \text{sinon} \end{array} \right. \tag{3.18}$$

$$k^3 = \left\{ \begin{array}{ll} k^2 - 1 & \text{si} \quad |a^2| \leqslant |b^2| \\ k^2 & \text{sinon} \end{array} \right. \tag{3.19}$$

iii.

$$Q^3(x) = Q^2(x) + c^2\,(x - x_{k^2})\,(x - x_{k^2+1})\,(x - x_{k^2+2})$$

(c)

$$\frac{dQ^3}{dx}(x_i) = \frac{dQ^2}{dx}(x_i) + c^2(3(i-k^2)^2 - 6(i-k^2) + 2)\Delta x^2 := d^{(3)}_{i,j}(k^1, k^2)$$

$$d^{(3)}_{i,j}(k^1, k^2) = d^{(2)}_{i,j}(k^1) + c^2(3(i-k^2)^2 - 6(i-k^2) + 2)\Delta x^2$$

$$\begin{cases} \text{si } k^1 = i-1 \quad \text{alors} \quad \phi_x^- = \frac{dQ^3}{dx}(x_i) = d^{(3)}_{i,j}(k^1, k^2) \\ \text{si } k^1 = i \quad\;\; \text{alors} \quad \phi_x^+ = \frac{dQ^3}{dx}(x_i) = d^{(3)}_{i,j}(k^1, k^2) \end{cases} \tag{3.20}$$

3.1.2 schémas WENO

Comme il a été évoqué précédemment, le fait que les schémas ENO choisissent l'une des trois approximations ENO potentielles pour le calcul de la dérivée peut induire des calculs instables de la solution dans les régions régulières, à cause de changements brutaux du choix du stencil d'un point de calcul à l'autre. Liu, Osher et Chan proposèrent de pallier ce problème en construisant la méthode Weighted ENO (WENO) [97] (1994). Au lieu de ne prendre qu'une seule approximation ENO, cette méthode utilise une combinaison convexe des trois approximations ENO affectées d'une pondération *ad hoc*. Le calcul des poids tient compte continuement de la régularité de la solution sur chaque stencil candidat. Dans les régions où la solution est discontinue, les interpolations afférentes sont affectées d'un poids proche de zéro (on retrouve alors les schémas ENO robustes et d'ordre élevé près des discontinuités). En revanche, dans les zones où la solution est régulière, les poids sont homogènes pour les trois approximations, ce qui permet d'obtenir un ordre élevé qui pouvait faire défaut à la méthode ENO originelle. En d'autres termes, les schémas WENO ont un comportement ENO dans les zones discontinues et les qualités des schémas centrés dans les parties régulières. Notons enfin que ces travaux sont basés sur la formulation "cell-averaged" des schémas ENO [71] pour des lois de conservation hyperboliques scalaires.
La version WENO de Liu, Osher et Chan proposait des schémas d'ordre 3 ou 4. Jiang et Shu [84] (1996) améliorèrent la méthode en créant une nouvelle mesure de la régularité et de nouveaux poids pour la combinaison convexe : ces travaux permirent d'obtenir des schémas WENO d'ordre 5 dans les zones régulières ; un schéma ENO d'ordre r donnant au mieux un schéma WENO d'ordre $2r-1$, ils atteignirent donc ici l'ordre optimal pour $r = 3$. Par ailleurs, précisons que ces travaux sont basés sur la formulation en flux des schémas ENO [151] - [152] et qu'ils sont généralisés dans un cadre à plusieurs dimensions.

On peut aussi remarquer que les schémas WENO, grâce à l'utilisation d'une combinaison convexe, s'affranchissent des tests logiques effectués dans la méthode ENO pour le choix du stencil. Ceci peut induire un gain de temps substantiel sur certains calculateurs [84].

De même qu'Osher et Sethian (1988) pour les méthodes ENO, Jiang et Peng [83] (2000) étendirent la méthode WENO aux équations de Hamilton-Jacobi en s'inspirant d'ailleurs des travaux d'Osher et Shu (1991) sur les méthodes HJ ENO. La formulation de Jiang et Peng consiste à appliquer directement le schéma WENO pour approcher les dérivées spatiales en des points coïncidents avec le maillage et non en des points intermédiaires comme le faisaient [84].

Dans la suite, on décrit l'approche de [84], [83] pour le schéma WENO d'ordre 5. De nouveau, on considère un point (i,j) de la grille en espace et on calcule une approximation de $\phi_x^{+,-}(x_i,y_j)$.

WENO 5

Pour déterminer ϕ_x^-, on pose :

$$\begin{aligned} v_1 = \frac{\phi_{i-2,j}-\phi_{i-3,j}}{\Delta x} \quad , \quad v_2 = \frac{\phi_{i-1,j}-\phi_{i-2,j}}{\Delta x} \quad , \quad v_3 = \frac{\phi_{i,j}-\phi_{i-1,j}}{\Delta x} \quad , \\ v_4 = \frac{\phi_{i+1,j}-\phi_{i,j}}{\Delta x} \quad , \quad v_5 = \frac{\phi_{i+2,j}-\phi_{i+1,j}}{\Delta x} \end{aligned} \tag{3.21}$$

alors que pour ϕ_x^+, on prend :

$$\begin{aligned} v_1 = \frac{\phi_{i+3,j}-\phi_{i+2,j}}{\Delta x} \quad , \quad v_2 = \frac{\phi_{i+2,j}-\phi_{i+1,j}}{\Delta x} \quad , \quad v_3 = \frac{\phi_{i+1,j}-\phi_{i,j}}{\Delta x} \quad , \\ v_4 = \frac{\phi_{i,j}-\phi_{i-1,j}}{\Delta x} \quad , \quad v_5 = \frac{\phi_{i-1,j}-\phi_{i-2,j}}{\Delta x} \end{aligned} \tag{3.22}$$

Ensuite, on définit les coefficients de régularité :

$$S_1 = \frac{13}{12}(v_1-2v_2+v_3)^2 + \frac{1}{4}(v_1-4v_2+3v_3)^2 \tag{3.23}$$

$$S_2 = \frac{13}{12}(v_2-2v_3+v_4)^2 + \frac{1}{4}(v_2-v_4)^2 \tag{3.24}$$

$$S_3 = \frac{13}{12}(v_3-2v_4+v_5)^2 + \frac{1}{4}(3v_3-4v_4+v_5)^2 \tag{3.25}$$

et les poids

$$\begin{aligned} a_1 = \frac{1}{10}\frac{1}{(\epsilon+S_1)^2} \quad , \quad w_1 = \frac{a_1}{a_1+a_2+a_3} \\ a_2 = \frac{6}{10}\frac{1}{(\epsilon+S_2)^2} \quad , \quad w_2 = \frac{a_2}{a_1+a_2+a_3} \\ a_3 = \frac{3}{10}\frac{1}{(\epsilon+S_3)^2} \quad , \quad w_3 = \frac{a_3}{a_1+a_2+a_3} \end{aligned} \tag{3.26}$$

on calcule finalement :

$$\phi_x^{+,-} = w_1\left(\frac{v_1}{3}-\frac{7v_2}{6}+\frac{11v_3}{6}\right) + w_2\left(\frac{-v_2}{6}+\frac{5v_3}{6}+\frac{v_4}{3}\right) + w_3\left(\frac{v_3}{3}+\frac{5v_4}{6}-\frac{v_5}{6}\right) \tag{3.27}$$

On peut prendre $\epsilon = 10^{-6}$. Outre les papiers de référence cités auparavant, une explication générale du comportement des schémas WENO est donnée dans [115] : on y trouvera des détails sur les coefficients de régularité, les poids et le choix du paramètre ϵ (qu'il ne faut pas confondre avec ε utilisé pour lisser la fonction de Heaviside).

3.1.3 Hamiltoniens numériques

Nous considérons ici la discrétisation en espace des équations de Hamilton-Jacobi générales de la forme :

$$\phi_t + \mathcal{H}(\nabla\phi) = 0 \tag{3.28}$$

en suivant le propos d'Osher et Fedkiw [115] sur [117].

A titre d'exemple, on se place en deux dimensions. L'extension à trois dimensions est directe en adoptant la même philosophie. Une discrétisation en temps de (3.28), par une méthode d'Euler explicite peut s'écrire :

$$\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\Delta t}+\widehat{H}^n\left(\phi_x^-,\phi_x^+,\phi_y^-,\phi_y^+\right)=0 \tag{3.29}$$

où $\widehat{H}\left(\phi_x^-,\phi_x^+,\phi_y^-,\phi_y^+\right)$ est une approximation numérique de $\mathcal{H}\left(\phi_x,\phi_y\right)$. On appelle $\widehat{H}$ le *Hamiltonien numérique* et on dit qu'il est *consistant* si $\widehat{H}\left(\phi_x,\phi_x,\phi_y,\phi_y\right)=\mathcal{H}\left(\phi_x,\phi_y\right)$. Les dérivées spatiales à gauche et à droite peuvent être calculées par un décentrage au premier ordre ou grâce à des méthodes d'ordre élevé comme celles décrites dans les sections précédentes. Dans la suite nous allons donner des Hamiltoniens numériques associés aux schémas monotones introduits par Crandall et Lions.

Schémas de Lax-Friedrichs

Crandall et Lions donnent, dans [38], la forme suivante pour le Hamiltonien numérique :

$$\widehat{H}=\mathcal{H}\left(\frac{\phi_x^-+\phi_x^+}{2},\frac{\phi_y^-+\phi_y^+}{2}\right)-\alpha^x\left(\frac{\phi_x^+-\phi_x^-}{2}\right)-\alpha^y\left(\frac{\phi_y^+-\phi_y^-}{2}\right) \tag{3.30}$$

où α^x et α^y sont des *coefficients de dissipation* qui contrôlent la *viscosité numérique*. Ces coefficients dépendent des dérivées partielles de $\mathcal{H}$ par rapport à ϕ_x et ϕ_y :

$$\alpha^x=\max\left|\mathcal{H}_1\left(\phi_x,\phi_y\right)\right|,\quad \alpha^y=\max\left|\mathcal{H}_2\left(\phi_x,\phi_y\right)\right| \tag{3.31}$$

L'utilisation de cet Hamiltonien conduit aux schémas dits de Lax-Friedrichs (LF).
La détermination des coefficients de dissipation peut être assez subtile. Dans la formulation originelle du schéma LF, le maximum est déterminé sur le domaine de calcul complet. Lorsque α augmente, il en va de même pour la dissipation numérique, ce qui détériore la qualité de la solution. Par conséquent, il est préférable de choisir α aussi faible que possible tout en évitant des phénomènes oscillatoires artificiels dans la solution. On comprend bien qu'en cas de valeurs hétérogènes de $\mathcal{H}_i$, certaines régions calculées se voient affecter une valeur de α trop grande. Afin d'éviter ces problèmes de diffusion numérique excessive dûs au calcul du maximum sur tout le domaine, plusieurs techniques ont été introduites, pour calculer les coefficients de dissipation dans un voisinage de chaque point discrétisé, conduisant aux schémas *Stencil* LF (SLF), *Local* LF (LLF) [152] et *Local Local* LF (LLLF) [117]. Le lecteur intéressé pourra se référer aux articles indiqués.

Schémas de Roe avec correction d'entropie

Devant la difficulté que constitue la détermination des coefficients de dissipation *ad hoc* dans (3.30), il est souvent souhaitable d'utiliser des méthodes upwind avec dissipation artificielle intégrée. Pour les lois de conservation, Shu et Osher [152] proposèrent d'utiliser la méthode upwind de Roe avec une correction d'entropie LLF aux points soniques où des chocs expansifs à entropie incompatible peuvent se former. La dissipation, ajoutée par la correction d'entropie, force les chocs à se transformer en ondes de raréfaction continues. Cette méthode fut surnommée *Roe Fix* (RF) et s'écrit pour des équations de Hamilton-Jacobi (*cf* [117]) :

$$\widehat{H}=\mathcal{H}\left(\phi_x^\star,\phi_y^\star\right)-\alpha^x\left(\frac{\phi_x^+-\phi_x^-}{2}\right)-\alpha^y\left(\frac{\phi_y^+-\phi_y^-}{2}\right) \tag{3.32}$$

où $\phi_x^\star$ et $\phi_y^\star$ sont calculés en utilisant une approche upwind basée sur le signe de $\mathcal{H}_1$ et $\mathcal{H}_2$. En présence d'un point sonique (lors d'un changement de signe de $\mathcal{H}_i$), on bascule du schéma RF au schéma LLF. Pour plus de détails, on pourra consulter [115].

Schémas de Godunov

Dans [61], Godunov proposa une méthode numérique qui donne la solution exacte du *problème de Riemann* pour des lois de conservation à donnée initiale constante par morceaux. Bardi et Osher donnèrent la formulation de ce schéma pour les équations de Hamilton-Jacobi multidimensionnelles dans [12] auquel on renvoie le lecteur. C'est le schéma monotone canonique. Disons simplement que pour l'équation de transport avec un champ de vitesse externe, le schéma de Godunov devient la méthode upwind basique.

3.2 Discrétisations en temps

Suivant le propos d'Osher et Fedkiw [115], l'une des approches utilisée pour réaliser la discrétisation en temps est la méthode dite *des lignes* qui consiste à supposer que la discrétisation spatiale peut être séparée de manière semi-discrète de la discrétisation en temps si bien que cette dernière peut être traitée indépendamment comme une équation différentielle ordinaire. Shu et Osher [151] proposèrent des méthodes TVD RK (*Total Variation Diminishing Runge-Kutta*) afin d'augmenter la précision d'une méthode des lignes pour la discrétisation en temps. Sous réserve que la "brique élémentaire" du schéma, constituée de la méthode d'Euler explicite, soit TVD conjointement avec la discrétisation en espace de l'EDP, alors ces méthodes RK n'induisent pas d'oscillation erronnée grâce à une discrétisation d'ordre élevé. Pour monter en ordre, il suffit de prendre des combinaisons convexes de pas d'Euler intermédiaires. Si tous les coefficients de pondération sont positifs, alors la méthode résultante est TVD.
Malheureusement, pour le cas considéré ici, les schémas HJ ENO et WENO ne sont pas TVD conjointement avec l'Euler explicite utilisé pour discrétiser (3.1) :

$$\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\Delta t}+\mathcal{H}\left(x,t,\phi,\nabla\phi\right)=0 \tag{3.33}$$

Cependant, les expériences numériques pratiques ont montré que les schémas HJ ENO et WENO sont probablement TVB (*Total Variation Bounded*). Par suite, la méthode complète est aussi TVB lorsque l'on utilise ces schémas TVD RK.

Nous donnons ci-dessous les algorithmes des schémas TVD RK d'ordre 2 et 3 développés par Shu et Osher [151]. L'ordre 1 étant classiquement obtenu en utilisant la méthode d'Euler explicite [*e.g.* (3.33)]. Pour résoudre l'équation différentielle ordinaire

$$\frac{du}{dt}=L(u) \tag{3.34}$$

où $L(u)$ est une discrétisation de l'opérateur spatial, le schéma d'ordre 2 s'écrit :

TVD RK 2

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^n+\Delta t L(u^n) \\ u^{n+1} &= \frac{1}{2}u^n+\frac{1}{2}u^{(1)}+\frac{1}{2}\Delta t L(u^{(1)}) \end{aligned} \tag{3.35}$$

ou [151]

$$u^{n+1} = u^n+\frac{1}{2}\Delta t\left(L(u^{(n)})+L(u^{(1)})\right)$$

La deuxième expression de u^{n+1} n'est autre que la *méthode* dite *d'Euler modifiée* ou *méthode de Heun*. Le schéma d'ordre 3, quant à lui, ne s'identifie pas à l'une des méthodes RK "classiques" (*cf* [151]) puisqu'il est de la forme :

TVD RK 3

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^n + \Delta t L(u^n) \\ u^{(2)} &= \frac{3}{4}u^n + \frac{1}{4}u^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t L(u^{(1)}) \\ u^{n+1} &= \frac{1}{3}u^n + \frac{2}{3}u^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t L(u^{(2)}) \end{aligned} \tag{3.36}$$

Le lecteur intéressé par les ordres 4 et 5 de ces méthodes pourra consulter [151]. Plus récemment, Spiteri et Ruuth proposèrent une nouvelle classe de méthodes RK dont le nombre de pas intermédiaires est supérieur à l'ordre de la méthode [158] ; on pourra aussi se reporter à d'autres travaux avec leurs collègues [11], [77], [135].

Remarque 3.1 : ordre, stabilité

Ordre nécessaire pour les équations Level Set

Selon Osher et Fedkiw [115], la pratique des méthodes Level Set fait ressortir qu'elles sont sensibles à la précision de la discrétisation en espace alors que de faibles ordres de précision en temps affectent beaucoup moins la qualité de la solution numérique. Par conséquent, ils préconisent l'utilisation du schéma HJ WENO d'ordre 5 pour discrétiser en espace et suggèrent, pour la plupart des applications, une méthode d'Euler d'ordre un en temps. Lorsqu'une discrétisation temporelle d'ordre élevé est nécessaire pour obtenir des solutions précises, on pourra alors utiliser les méthodes TVB RK d'ordre 2 ou 3.

Stabilité

La stabilité des schémas utilisés est assurée si la condition CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) suivante est vérifiée (dans un espace à trois dimensions) :

$$\Delta t \max\left(\frac{|\mathcal{H}_1|}{\Delta x} + \frac{|\mathcal{H}_2|}{\Delta y} + \frac{|\mathcal{H}_3|}{\Delta z}\right) = C_{\text{cfl}} \tag{3.37}$$

avec $0 < \text{cfl} < 1$. Les $\{\mathcal{H}_i\}_{i=1,2,3}$ sont respectivement les dérivées partielles de $\mathcal{H}$ par rapport à ϕ_x, ϕ_y et ϕ_z. Ainsi, a-t-on pour l'équation de transport avec la vitesse $\mathbf{v} = (u; v; w)$, $\mathcal{H}_1 = u$, $\mathcal{H}_2 = v$ et $\mathcal{H}_3 = w$. Un critère $C_{\text{cfl}} = 0.9$ permettra d'avancer plus vite en temps mais il n'est pas rare de prendre $C_{\text{cfl}} = 0.5$, plus sûr au regard de la stabilité.
D'un point de vue plus général, on adaptera, naturellement, le choix de la CFL au schéma numérique utilisé.

3.3 Transport et redistanciation

Les schémas que nous venons de voir sont largement utilisés par la communauté Level Set pour résoudre les équations de transport et de redistanciation. Nous en montrons maintenant

la mise en oeuvre sur ces deux cas.

3.3.1 Résolution de l'équation de transport

Comme évoqué précédemment, l'interface est déplacée grâce à la résolution de l'équation de transport (2.3). Cette tâche est rendue plus facile grâce à la régularité de ϕ. Cependant, pour remédier à l'un des défauts souvent évoqué au sujet de la méthode Level Set, à savoir, la mauvaise conservation du volume contenu au sein de l'interface, il faut utiliser des schémas numériques d'ordre élevé. L'une des approches consiste à résoudre (2.3) à l'aide de schémas ENO ou WENO que nous avons décrits précédemment.

Dans un cadre bidimensionnel, $\mathbf{v} = (u; v)$ et (2.3) se développe en :

$$\phi_t + u\phi_x + v\phi_y = 0 \tag{3.38}$$

discrétisation en espace

Que l'on adopte le schéma de Lax-Friedrichs ou de Godunov, on obtient le schéma upwind classique. On discrétise donc $u\phi_x$ à l'aide de (3.4) et on fait de même pour $v\phi_y$ en remplaçant u par v. Les calculs de $\phi_{x,y}^{+,-}$ sont réalisés à l'aide des méthodes ENO ou WENO.

discrétisation en temps

On utilise les schémas TVD RK décrits plus haut, avec l'ordre de précision désiré.

3.3.2 Résolution de l'équation de redistanciation

Evoquée au chapitre 2, l'utilisation de l'équation de redistanciation sera présentée de manière approfondie au chapitre 4. Il s'agit ici de résoudre le problème :

$$\begin{cases} d_t + \text{sign}\,(\phi_0)\ (|\nabla d| - 1) = 0 \\ d(x,0) = \phi_0 \end{cases} \tag{3.39}$$

On s'intéresse plus particulièrement au cas bidimensionnel et on écrit :

$$d_t + \frac{\text{sign}\,(\phi_0)\, d_x}{\sqrt{{d_x}^2 + {d_y}^2}}\, d_x \ + \ \frac{\text{sign}\,(\phi_0)\, d_y}{\sqrt{{d_x}^2 + {d_y}^2}}\, d_y = \text{sign}\,(\phi_0) \tag{3.40}$$

Grâce à cette formulation, il apparaît une équation de transport dont la vitesse dépend de l'inconnue. Pour résoudre cette équation de Hamilton-Jacobi on suit l'idée de [169] (voir aussi [166], [167], [117], [132], [83]).

discrétisation en espace

L'idée consiste à calculer $d_x^{\pm}$ à l'aide de sa méthode favorite puis à utiliser une méthode de type Godunov pour réaliser l'*upwinding*. On fait de même pour d_y. Ensuite, il ne reste plus qu'à injecter les valeurs de d_x et d_y déterminées par la méthode de Godunov dans la version la plus concise de l'équation (3.39), *i.e.*

$$d_t + \text{sign}\,(\phi_0)\ \left(\sqrt{{d_x}^2 + {d_y}^2} - 1\right) = 0 \tag{3.41}$$

Plus précisément, on utilise l'algorithme suivant :

1. Calcul de $d_x^{\pm}$
2. Upwind type Godunov pour calculer d_x

$$d_x = \begin{cases} d_x^+ & \text{si} \quad d_x^+ \text{sign}(\phi_0) < 0 \text{ et } (d_x^+ + d_x^-)\text{sign}(\phi_0) < 0 \\ d_x^- & \text{si} \quad d_x^- \text{sign}(\phi_0) > 0 \text{ et } (d_x^+ + d_x^-)\text{sign}(\phi_0) > 0 \\ 0 & \text{si} \quad d_x^- \text{sign}(\phi_0) < 0 \text{ et } d_x^+ \text{sign}(\phi_0) > 0 \end{cases} \tag{3.42}$$

3. Répéter ces deux étapes pour calculer d_y
4. Calcul de l'opérateur discret en espace avec (3.41), d_x et d_y

discrétisation en temps

On utilise les schémas TVD RK décrits plus haut, avec l'ordre de précision désiré.

3.4 Cas test pour l'équation de transport

Nous avons réalisé des cas test pour étudier le comportement des schémas numériques susnommés lorsqu'ils sont appliqués à la résolution de l'équation de transport en deux dimensions d'espace. Trois configurations classiques ont été choisies : une translation rectiligne d'un cercle, une rotation d'un cercle simple grâce à un champ de vitesse non déformant et le test de Zalesak. Nous allons tout d'abord détailler avec soin les caractéristiques de ces cas test puis donnerons les résultats des études de convergence afférentes.

Dans chaque configuration, on résoud l'équation de transport

$$\phi_t + u\phi_x + v\phi_y = 0 \tag{3.43}$$

avec un champ de vitesse (u,v) indépendant du temps. La discrétisation en temps est réalisée grâce au schéma de type Runge-Kutta d'ordre trois décrit précédemment. Les schémas ENO et WENO sont utilisés pour examiner leur ordre de précision pour la discrétisation en espace.

3.4.1 Translation diagonale d'un cercle

Nous considérons la donnée initiale :

$$\phi_0(x,y) = \sqrt{x^2+y^2} - 1 \tag{3.44}$$

plongée dans le champ de vitesse :

$$u(x,y) = v(x,y) = 1$$

Un cercle de rayon 1 subit donc une translation diagonale. Le domaine de calcul est le carré $[0;4] \times [0;4]$ et on calcule le transport durant 4 unités de temps. Les conditions aux limites sont données par la solution analytique de ce problème *i.*e. :

$$\phi(x,y;t) = \sqrt{(x-t)^2+(y-t)^2} - 1 \tag{3.45}$$

3.4.2 Rotation d'un cercle simple

Il s'agit dans ce cas de faire tourner un cercle dans un champ de vitesse circulaire non déformant. Le domaine de calcul est le carré $[0;100]\times[0;100]$. La condition initiale est l'interface constituée par le cercle de rayon 15 centré en $(50,75)$:

$$\phi_0(x,y) = \sqrt{(x-50)^2+(y-75)^2} - 15 \tag{3.46}$$

Le champ de vitesse utilisé est :

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

Le transport est effectué jusqu'à $t = 628$ de telle manière que le cercle fasse un tour complet en retrouvant sa position initiale. Les conditions aux limites sont encore données par la solution analytique de ce problème :

$$\phi(x,y;t) = \sqrt{(x-x_c(t))^2+(y-y_c(t))^2} - 15 \tag{3.47}$$

avec

$$\begin{aligned} x_c(t) &= 50 + 25\cos\left(\frac{\pi t}{314}+\frac{\pi}{2}\right) \\ y_c(t) &= 50 + 25\sin\left(\frac{\pi t}{314}+\frac{\pi}{2}\right) \end{aligned}$$

Pour ces calculs, le pas de temps est égal au pas d'espace.

3.4.3 Test de Zalesak

Ce test, qui met en jeu la rotation d'un disque présentant une entaille rectangulaire, a été introduit par S. T. Zalesak dans [192]. Cette configuration est bien adaptée à l'étude du comportement des schémas pour le transport d'interfaces à fortes courbures. Le disque de Zalesak est représenté en trait noir épais sur la Figure 3.3. On considère le carré $[0;100]\times[0;100]$ et un cercle de centre $(50,75)$ et de rayon 15 dont l'entaille a une dimension horizontale (largeur) de 5 mailles et est telle que la longueur maximale du "pont" reliant les deux moitiés de disque soit aussi de 5 mailles. Le champ de vitesse et le temps de calcul sont les mêmes que pour le test de la rotation du cercle simple présenté auparavant. Pas d'espace et de temps sont aussi pris égaux. En revanche, la donnée initiale est plus technique à construire puisque qu'on affecte à ϕ_0 la distance signée à cette interface. Les isovaleurs de ϕ_0 sont représentées en couleurs sur la Figure 3.3 ($\phi_0 < 0$ à l'intérieur de l'objet et $\phi_0 > 0$ à l'extérieur).

3.4.4 Etudes de convergence

Pour chaque type de test, nous réalisons une étude de convergence en calculant l'ordre de précision numérique induit par le schéma numérique utilisé. Dans ce but, on calcule les erreurs entre la solution approchée et la solution analytique pour des maillages en espace de plus en plus fin.

Deux types d'erreurs sont calculés. D'une part, l'erreur L^∞ discrète classique :

$$\max_{i,j}(|\phi_{exact}(i,j) - \phi_{calculé}(i,j)|) \tag{3.48}$$

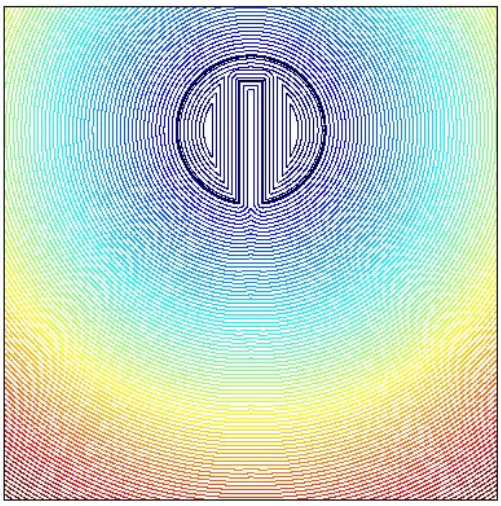


FIG. 3.3 – Disque de Zalesak (trait noir épais) et donnée initiale (isos colorées)

D'autre part, l'erreur qui mesure la différence entre l'interface calculée et l'interface théorique :

$$\frac{1}{L}\int_{\Omega} |H(\phi_{exact}) - H(\phi_{calculé})|\, dxdy \tag{3.49}$$

où L est la longueur de l'interface analytique. Cette mesure de l'erreur est directement inspirée de [167]. D'un point de vue discret, on prendra :

$$\frac{\Delta x\, \Delta y}{L} \sum_{i,j} |H(\phi_{exact}(i,j)) - H(\phi_{calculé}(i,j))| \tag{3.50}$$

Les tableaux qui suivent donnent les erreurs en fonction du maillage pour les différentes configurations. On note N, le nombre de mailles dans chaque direction (pour tous les tests, $\Delta x = \Delta y$), Erreur, l'erreur calculée par (3.50) et Erreur L^∞, celle calculée par (3.48). L'ordre numérique est calculé classiquement grâce à la relation :

$$\text{Ordre} = \frac{\ln(e_h/e_{\bar{h}})}{\ln(h/\bar{h})} \tag{3.51}$$

où e_h et $e_{\bar{h}}$ sont respectivement les erreurs associées aux maillages de pas h et $\bar{h}$. Dans les tables qui suivent on a $h/\bar{h} = 2$ sauf pour le cas N=300 (distingué par la dernière ligne "300*" dans les tableaux 3.3, 3.6, 3.8 et 3.11), où $h/\bar{h} = 3/2$ (l'ordre étant calculé avec N=200 et N=300 et non pas avec N=200 et N=400).

ENO1

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
16	1,18E-01		9,89E-01	
32	7,59E-02	0,64	7,67E-01	0,37
64	3,02E-02	1,33	5,67E-01	0,44
128	1,32E-02	1,19	4,13E-01	0,46
256	6,29E-03	1,07	2,99E-01	0,47
512	3,08E-03	1,03	2,15E-01	0,48
1024	1,53E-03	1,01	1,52E-01	0,49
2048	7,60E-04	1,01	1,09E-01	0,48

TAB. 3.1 – Etude de convergence ENO1 : translation du cercle simple

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
25	7,66E+00		2,45E+01	
50	7,54E+00	0,02	1,72E+01	0,51
100	4,78E+00	0,66	1,21E+01	0,51
200	2,16E+00	1,15	8,58E+00	0,50
400	1,00E+00	1,11	6,09E+00	0,49
800	4,85E-01	1,05	4,33E+00	0,49

TAB. 3.2 – Etude de convergence ENO1 : rotation du cercle simple

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
25	4,09E+00		1,91E+01	
50	4,08E+00	0,00	1,29E+01	0,57
100	4,06E+00	0,01	8,79E+00	0,55
200	3,53E+00	0,2	6,29E+00	0,48
400	2,33E+00	0,6	4,76E+00	0,40
800	1,42E+00	0,72	3,51E+00	0,44
300*	2,82E+00	0,56	5,31E+00	0,42

TAB. 3.3 – Etude de convergence ENO1 : problème de Zalesak

Nous donnons, ci-dessous, les résultats graphiques de l'étude du problème de Zalesak. Les figures représentent, en noir l'isovaleur 0 de la fonction Level Set exacte à t=628 et en bleu celle de la fonction obtenue par résolution de l'équation de transport. Remarquons que ces deux interfaces sont construites sur les mêmes maillages ce qui explique la modification de la forme de la solution analytique lorsque les maillages sont raffinés. De même que pour les tableaux des erreurs de convergence, les figures sont celles obtenues pour des maillages à 25, 50, 100, 200, 400 et 800 mailles dans chaque direction. (Figures 3.4 à 3.9). Pour les six figures, le carré qui englobe les disques de Zalesak correspond au domaine de calcul. On remarque que sur les trois premières figures, l'interface bleue n'est pas présente à cause du faible ordre de précision du schéma ENO1 : aprés une révolution, ϕ a été complètement "érodée" et l'iso-0 est vide.

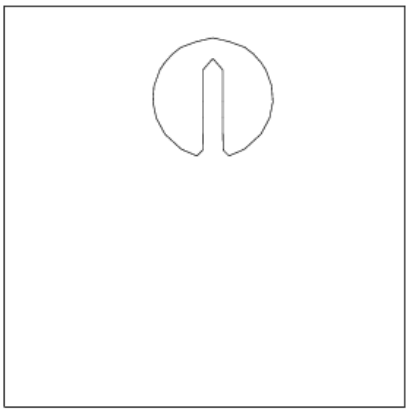


FIG. 3.4 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 25 ; ENO1

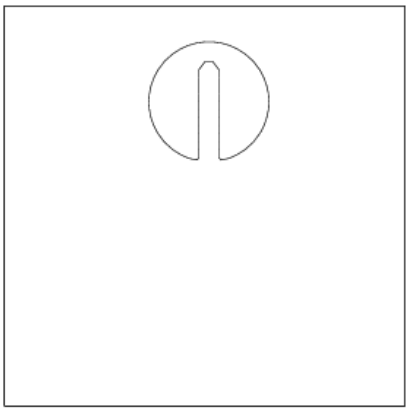


FIG. 3.5 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 50 ; ENO1

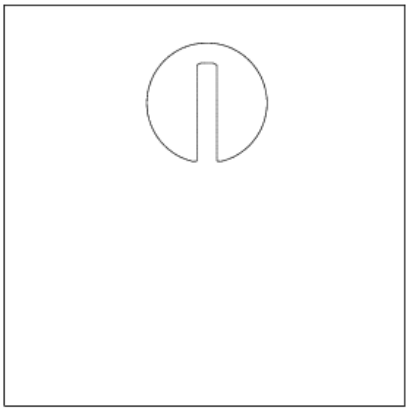


FIG. 3.6 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 100 ; ENO1

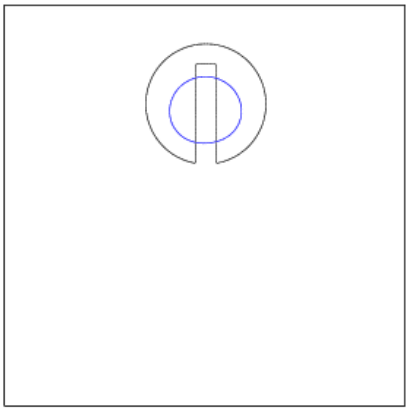


FIG. 3.7 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 200 ; ENO1

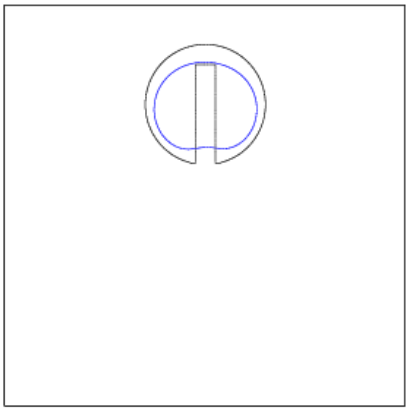


FIG. 3.8 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 400 ; ENO1

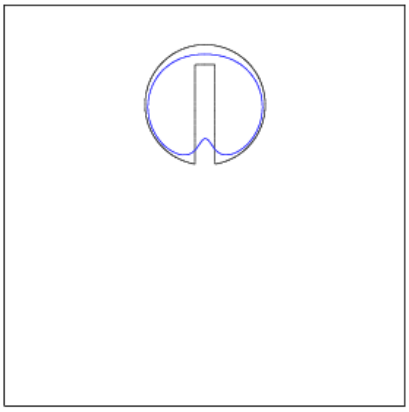


FIG. 3.9 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 800 ; ENO1

ENO2

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
16	2,45E-02		3,75E-01	
32	6,27E-03	1,97	2,74E-01	0,45
64	1,47E-03	2,09	1,85E-01	0,56
128	3,44E-04	2,09	1,23E-01	0,59
256	8,36E-05	2,04	8,09E-02	0,61
512	2,06E-05	2,02	5,27E-02	0,62
1024	5,13E-06	2,01	3,33E-02	0,66
2048	1,28E-06	2,00	2,17E-02	0,62

TAB. 3.4 – Etude de convergence ENO2 : translation du cercle simple

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
25	2,82E+00		9,26E+00	
50	7,09E-01	1,99	5,63E+00	0,72
100	1,62E-01	2,13	3,50E+00	0,69
200	3,95E-02	2,04	2,28E+00	0,62
400	9,81E-03	2,01	1,48E+00	0,63
800	2,45E-03	2,00	9,55E-01	0,63

TAB. 3.5 – Etude de convergence ENO2 : rotation du cercle simple

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
25	2,82E+00		5,97E+00	
50	2,52E+00	0,16	5,21E+00	0,20
100	1,47E+00	0,77	3,88E+00	0,43
200	6,62E-01	1,15	2,74E+00	0,50
400	1,52E-01	2,13	1,64E+00	0,74
800	3,94E-02	1,95	1,01E+00	0,70
300*	2,75E-01	2,17	2,02E+00	0,75

TAB. 3.6 – Etude de convergence ENO2 : problème de Zalesak

Comme précédemment, nous donnons les résultats graphiques de l'étude du test de Zalesak, sur les Figures 3.10 à 3.15. Pour les quatre premières, le carré qui englobe les disques de Zalesak correspond au domaine de calcul alors que pour les deux dernières, nous avons choisi de zoomer sur les disques pour mieux se rendre compte de la convergence vers la solution exacte. Même si, pour les maillages grossiers, les résultats ne sont pas visuellement d'excellente qualité, on constate tout de même une amélioration sensible vis-à-vis du schéma ENO1 (l'isovaleur 0 est réapparue ...). Ceci est d'ailleurs confirmé par les résultats quantitatifs des tables 3.3 et 3.6.

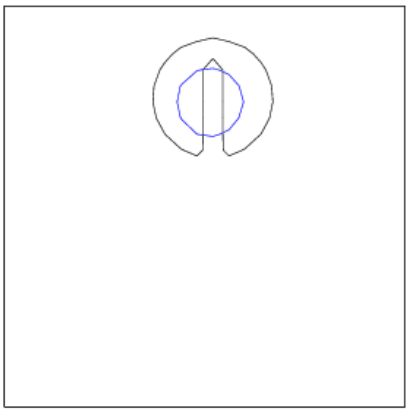


FIG. 3.10 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 25 ; ENO2

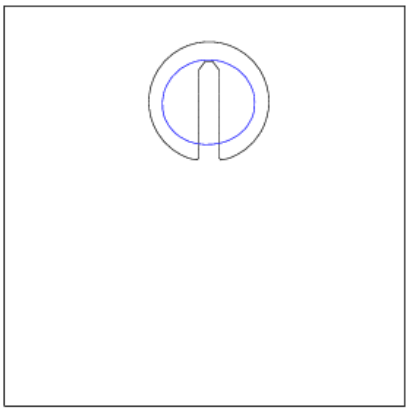


FIG. 3.11 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 50 ; ENO2

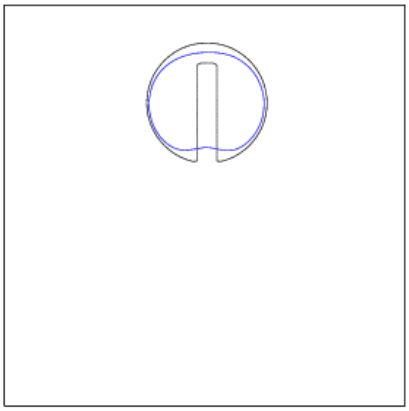


FIG. 3.12 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 100 ; ENO2

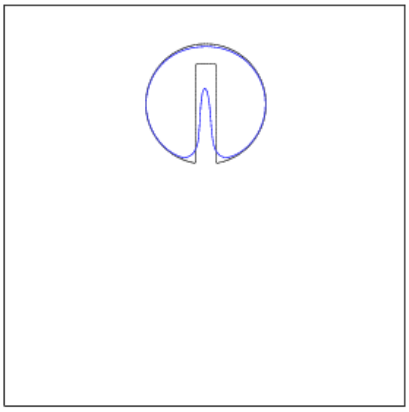


FIG. 3.13 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 200 ; ENO2

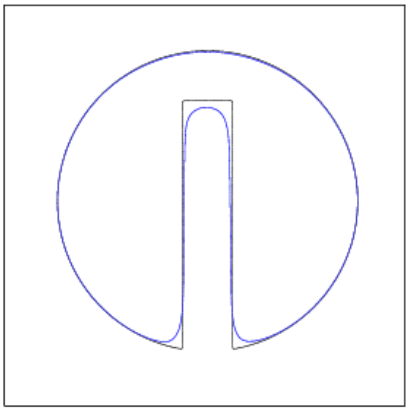


FIG. 3.14 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 400 ; ENO2

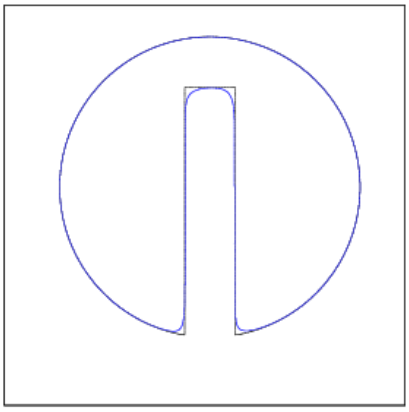


FIG. 3.15 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 800 ; ENO2

ENO3

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
25	9,42E-01		6,13E+00	
50	1,32E-01	2,84	3,40E+00	0,85
100	3,08E-02	2,1	1,97E+00	0,79
200	7,40E-03	2,06	1,28E+00	0,62
400	1,80E-03	2,04	9,44E-01	0,44
800	6,00E-04	1,59	6,83E-01	0,47

TAB. 3.7 – Etude de convergence ENO3 : rotation du cercle simple

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
25	2,49E+00		5,96E+00	
50	1,41E+00	0,82	3,78E+00	0,66
100	4,39E-01	1,68	2,02E+00	0,91
200	1,04E-01	2,07	1,34E+00	0,59
400	3,13E-02	1,74	8,89E-01	0,59
800	1,04E-02	1,59	5,44E-01	0,71
300*	5,18E-02	1,72	1,04E+00	0,63

TAB. 3.8 – Etude de convergence ENO3 : problème de Zalesak

De même, nous présentons les résultats graphiques de l'étude du problème de Zalesak sur les Figures 3.16 à 3.21. Pour les trois premières figures le carré qui englobe les disques de Zalesak correspond au domaine de calcul alors que pour les trois suivantes, nous avons choisi de zoomer sur les disques pour mieux constater la convergence vers la solution exacte. Une nouvelle fois, la montée en ordre, entre ENO2 et ENO3, se traduit par une baisse des erreurs et une amélioration des résultats visuels de convergence vers l'interface analytique.

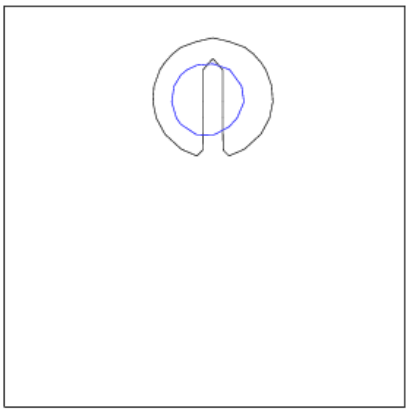


FIG. 3.16 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 25 ; ENO3

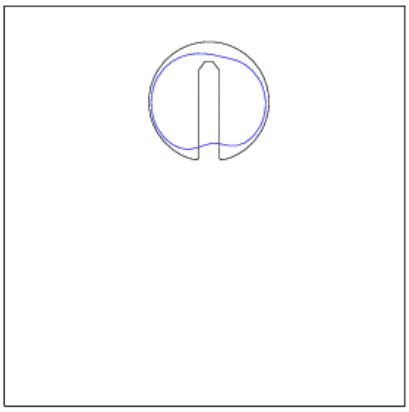


FIG. 3.17 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 50 ; ENO3

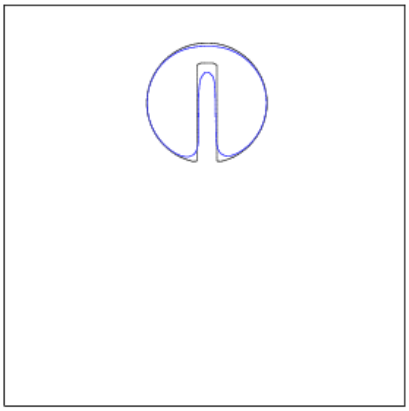


FIG. 3.18 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 100 ; ENO3

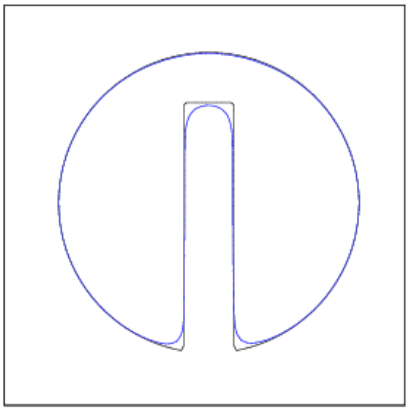


FIG. 3.19 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 200 ; ENO3

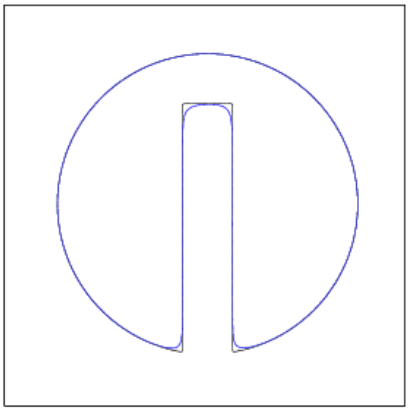


FIG. 3.20 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 400 ; ENO3

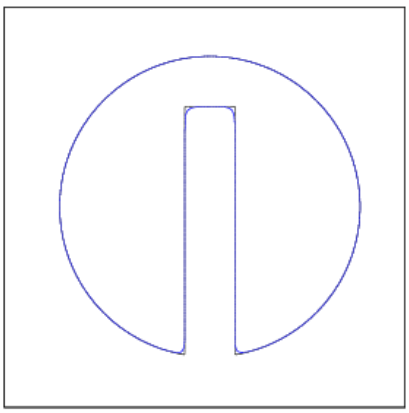


FIG. 3.21 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 800 ; ENO3

WENO5

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
16	1,04E-03		2,11E-01	
32	1,87E-04	2,48	1,29E-01	0,71
64	1,30E-06	7,17	7,10E-02	0,86
128	7,09E-08	4,19	3,96E-02	0,84
256	5,35E-09	3,73	2,26E-02	0,81
512	4,18E-10	3,68	1,34E-02	0,76
1024	3,06E-11	3,77	7,23E-03	0,88

TAB. 3.9 – Etude de convergence WENO5 : translation du cercle simple

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
25	2,44		4,43	
50	7,08E-02	5,11	2,16	1,04
100	2,90E-03	4,61	1,12	0,95
200	1,30E-04	4,48	6,61E-01	0,75
400	1,48E-05	3,13	3,89E-01	0,76
800	1,91E-06	2,95	2,28E-01	0,77

TAB. 3.10 – Etude de convergence WENO5 : rotation du cercle simple

N	Erreur	Ordre	Erreur L^∞	Ordre
25	2,08		6,02	
50	8,82E-01	1,24	3,18	0,92
100	1,47E-01	2,58	1,60	0,99
200	3,35E-02	2,14	8,72E-01	0,87
400	1,04E-02	1,69	5,12E-01	0,77
800	3,34E-03	1,64	2,94E-01	0,80
300*	1,68E-02	1,71	6,22E-01	0,83

TAB. 3.11 – Etude de convergence WENO5 : problème de Zalesak

Nous illustrons enfin les résultats de l'évolution du cercle de Zalesak avec le schéma WENO5 sur les Figures 3.22 à 3.27. Une nouvelle fois, les trois premières figures représentent tout le domaine de calcul alors que pour les trois suivantes, on a réalisé un zoom sur les disques.

Ces résultats quantitatifs et graphiques sont comparables à ceux présentés dans [166]. Pour le problème de Zalesak, il ressort que le schéma WENO5 sans redistanciation permet d'avoir des résultats comparables au schéma ENO3 avec redistanciation sous contrainte de Sussman et Fatemi.

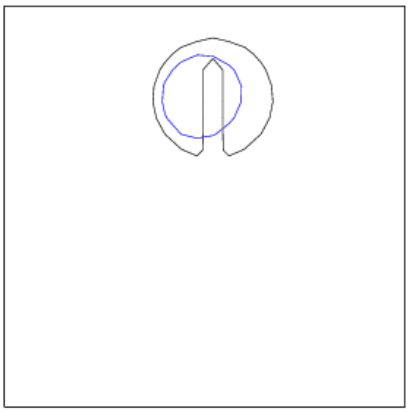


FIG. 3.22 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 25 ; WENO5

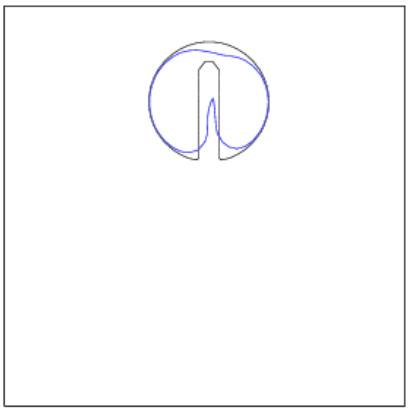


FIG. 3.23 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 50 ; WENO5

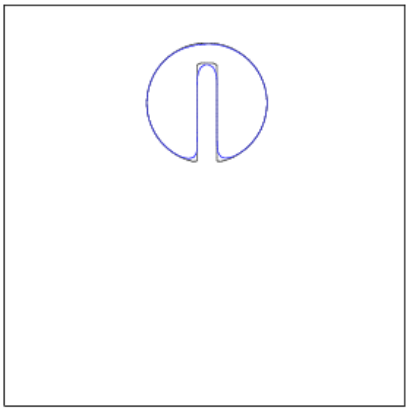


FIG. 3.24 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 100 ; WENO5

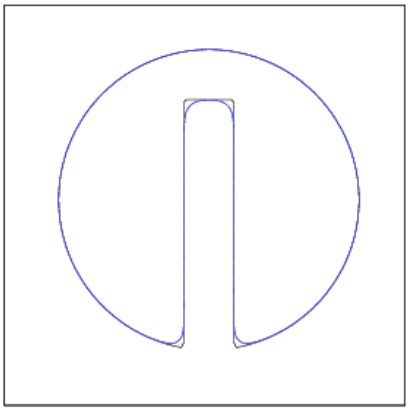


FIG. 3.25 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 200 ; WENO5

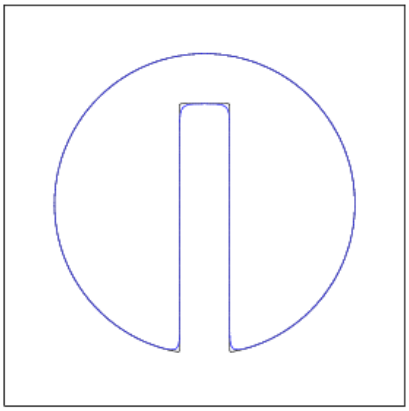


FIG. 3.26 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 400 ; WENO5

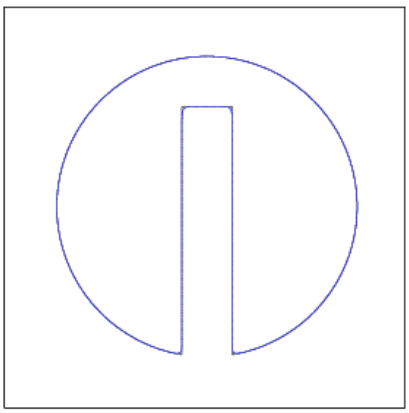


FIG. 3.27 – ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 800 ; WENO5

Il est par ailleurs intéressant de représenter la différence entre la solution exacte et la solution calculée $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$.
Par exemple, la Figure 3.28 présente l'allure de cette quantité pour le calcul avec 200 mailles et le schéma ENO1. On constate bien que les plus fortes erreurs se concentrent au niveau des zones non régulières de la fonction Level Set. La Figure 3.29 correspond au même calcul mais avec 800 mailles. On présente ce même type de cartes pour les schémas ENO2 et ENO3 sur les Figures 3.30 à 3.33 Enfin, la Figure 3.34 donne la carte pour le calcul avec 200 mailles et le schéma WENO5.
Pour toutes les cartes avec 200 mailles, on constate l'amélioration apportée par la montée en ordre d'ENO1 à WENO5.

Synthèse

Au travers des tests précédents, on a tout d'abord illustré la dépendance naturelle de la performance des schémas relativement à la régularité de ϕ. Ainsi, les nombreuses zones non dérivables du cercle de Zalesak induisent-elles des erreurs plus marquées, comparativement aux cas moins raides du cercle simple. On remarque aussi qu'un schéma (W)ENOi n'est pas nécessairement d'ordre i, comme le montrent les tableaux de convergence précédents. Le fait que les ordres numériques soient légèrement inférieurs aux ordres théoriques est un phénomène classique lorsque les schémas sont appliqués en dimension supérieure ou égale à deux (parmi les causes on compte notamment le fait que la condition CFL, permettant d'obtenir un schéma "exact" en 1D, n'est plus réalisable en 2D avec des écoulements dans des directions transverses par rapport au maillage). Néanmoins, les résultats obtenus montrent une précision accrue à chaque montée en ordre et pour tous les cas tests.

Par ailleurs, on constate que le schéma WENO5 permet d'atteindre de bons résultats et des ordres strictement supérieurs à un, voire quasiment deux sur un cas aussi pathologique que le test de Zalesak. Au vu de sa simplicité et de ses performances, nous l'avons utilisé dans tous les travaux qui seront présentés ultérieurement dans ce manuscrit. Les comparaisons avec les travaux Sussman et Fatemi [166], nous ont orientés vers ce choix, qui à précision équivalente est beaucoup plus simple à implémenter.

Une autre justification pour le choix de ce schéma est lié au dégré de précision toléré par nos applications. Tout d'abord, il convient de présenter les variations du volume induites par la discrétisation WENO5 pour l'équation de transport. Dans le tableau 3.12, on donne ces variations calculées pour les cas test de la rotation du cercle simple (colonne labélisée "Cercle") et du disque de Zalesak (colonne labélisée "Zalesak"). On note "Max" la colonne qui donne la variation maximum par rapport à la masse initiale, au cours d'une révolution. La variation moyenne est aussi fournie dans la colonne "Moy". Dans les deux situations, le "volume" défini par l'interface n'est autre que l'aire dont la valeur discrète est obtenue via (*cf.* 2.9) :

$$\Delta x \, \Delta y \sum_{i,j} \left(1 - H\left(\phi_{calculé}(i,j)\right)\right) \tag{3.52}$$

Ce choix des valeurs de N est motivé par le fait qu'il conduit à des discrétisations avec 30 à 60 mailles dans la structure constituant l'interface : ceci correspond aux maillages les plus grossiers que l'on utilisera dans la suite. Les écarts constatés entre la moyenne et le maximum s'expliquent par l'utilisation de la fonction de Heaviside. Si l'on réalise le calcul (3.52) avec la fonction lissée H_ε, les écarts faiblissent et se rapprochent de la moyenne. On constate

	Cercle		Zalesak	
	Max	Moy	Max	Moy
N = 100	2.58%	1.28%	2.79%	1.09%
N = 200	0.56%	0.24%	0.99%	0.47%

TAB. 3.12 – Variations de volume avec le schéma WENO5

donc que, dans cette gamme, les erreurs de volume sont de l'ordre de 1% ; ce qui, pour nos applications en microfluidique, est tout à fait satisfaisant. Qui plus est, pour nos simulations avec des maillages plus raffinés, cette variation vérifiera d'autant plus les exigences de précision.

Ainsi, dans ce chapitre, nous avons détaillé une classe de schémas numériques, pour discrétiser les équations d'Hamilton-Jacobi, qui est largement répandue dans la communauté Level Set de par sa proximité avec Stanley Osher. En particulier, nous avons montré que le schéma WENO5 convenait parfaitement pour les présents travaux tant pour sa simplicité d'implémentation que pour le niveau de précision atteint sur un cas test aussi rude que le cercle de Zalesak. Ce schéma constituera donc l'outil de base dans la suite de ce manuscrit pour les équations liées à la méthode Level Set.

Aprés avoir considéré plus particulièrement l'équation de transport, nous allons, dans le prochain chapitre, présenter plus précisément certaines subtilités des méthodes de redistanciation.

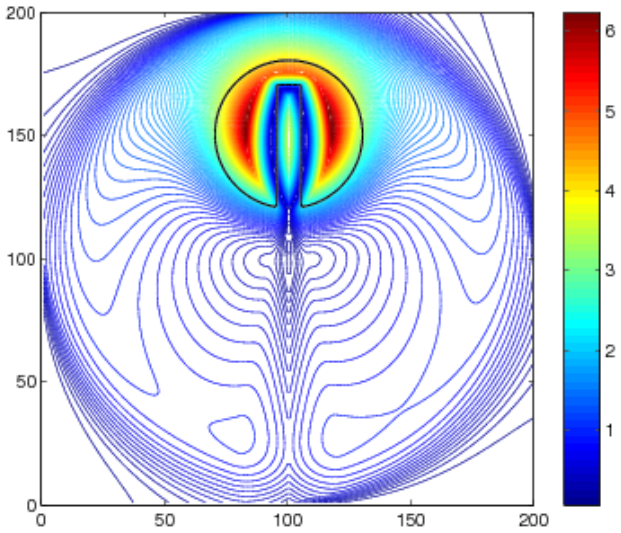


FIG. 3.28 – ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 200, ENO1

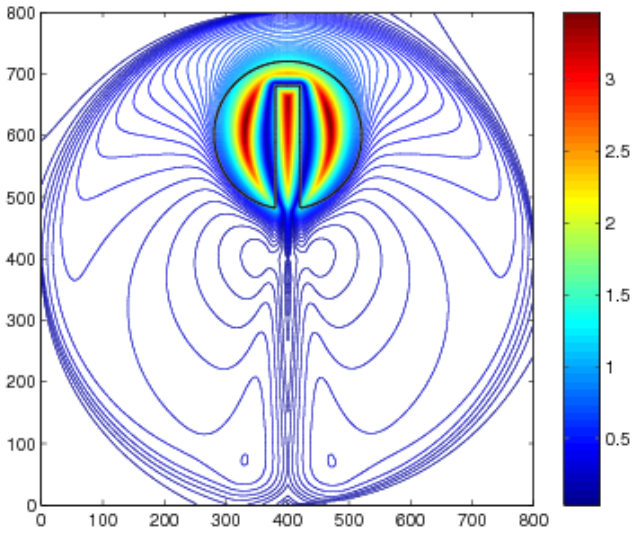


FIG. 3.29 – ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 800, ENO1

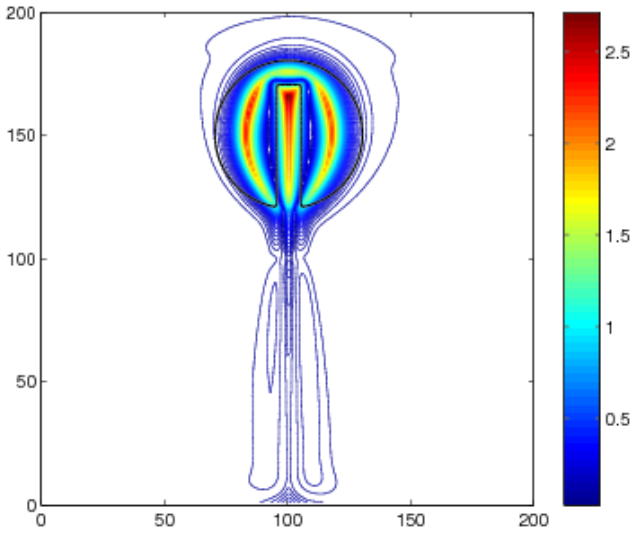


FIG. 3.30 – ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 200, ENO2

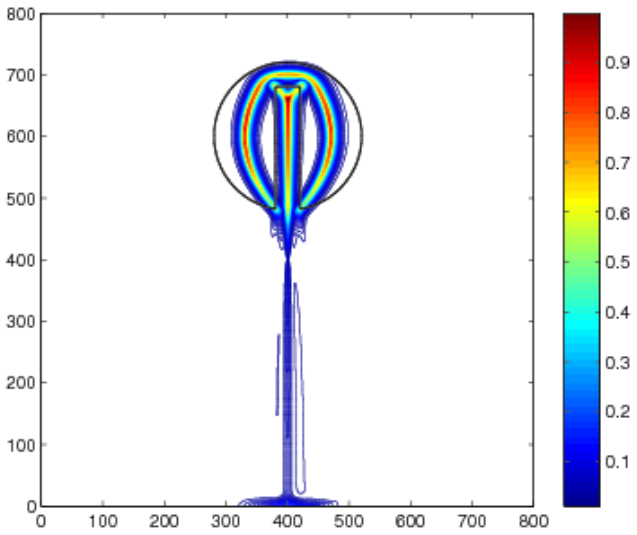


FIG. 3.31 – ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 800, ENO2

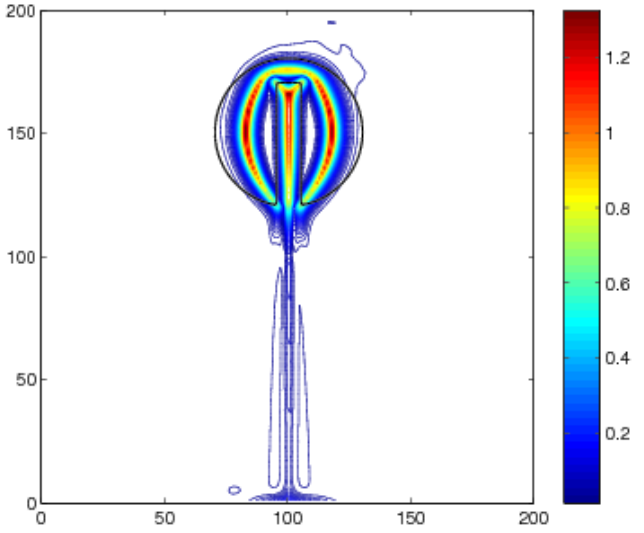


FIG. 3.32 – ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 200, ENO3

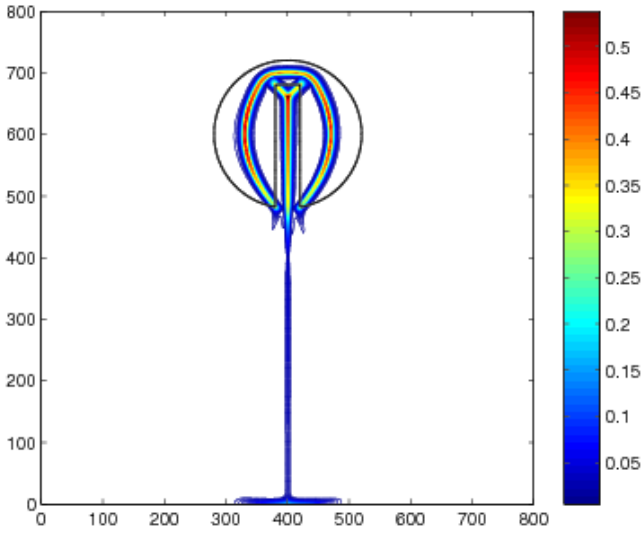


FIG. 3.33 – ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 800, ENO3

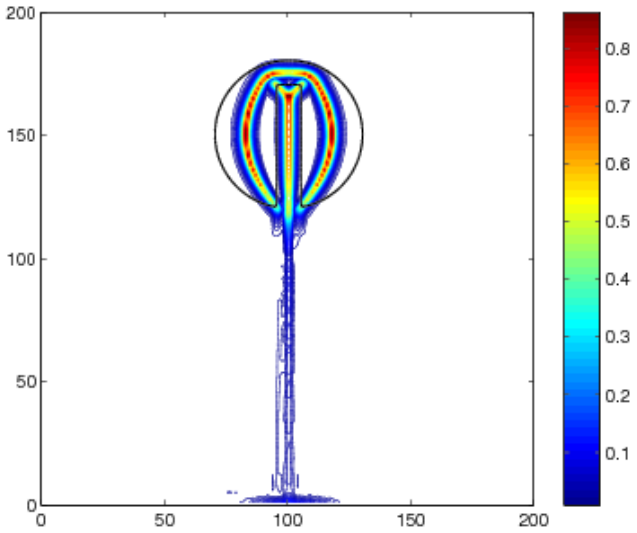


FIG. 3.34 – ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 200, WENO5

Chapitre 4

Méthodes pour la redistanciation

Comme nous l'avons laissé entendre au cours des chapitres précédents, l'une des composantes importantes de la méthode Level Set est l'opération de redistanciation. Pour ce faire, il existe plusieurs approches. C'est pourquoi le présent chapitre est entièrement dédié à ce sujet. Nous montrerons en particulier que la résolution numérique de ce type de problème requiert une certaine finesse et qu'il existe des voies qui permettent d'optimiser sérieusement le temps de calcul. Aussi commencerons-nous par présenter une approche qui s'inscrit dans la droite ligne des idées du chapitre précédent, adjointes à différents raffinements, ainsi que leur application au problème d'extension des quantités dans la direction normale à l'interface. Ensuite, nous détaillerons les méthodes *Fast Marching*.

4.1 Utilisation de l'équation de redistanciation

Nous avons vu précédemment que la méthode Level Set utilise l'équation de *redistanciation*. Il s'agit de l'un des outils disponibles pour construire des fonctions distances.

Depuis l'introduction de la méthode en 1988, les utilisateurs ont peu à peu modifié le type de surfaces ϕ utilisées pour capturer l'interface. Ainsi, s'il est assez intuitif de comprendre que l'utilisation d'une fonction ϕ régulière donne de meilleurs résultats qu'une fonction discontinue lors de la résolution de l'équation de transport, il a fallu plusieurs étapes pour introduire les fonctions level set utilisées aujourd'hui.

A l'origine, Osher et Sethian [116] initialisèrent leurs calculs avec $\phi = 1 \pm d^2$ où d est la distance signée à l'interface. En 1992, Mulder, Osher et Sethian [110] montraient que la méthode est améliorée si on initialise simplement $\phi = d$. En 1993, Chopp [27], constatant l'apparition de zones où ϕ présente de forts gradients et d'autres où, au contraire, les lignes de niveau s'écartent, introduit le concept de *réinitialisation*. Périodiquement, au cours de la simulation, il propose de recalculer ϕ de manière à ce qu'elle redevienne une fonction distance. Autrement dit, il faut résoudre le problème :

> *Soit* ϕ_0 *définissant implicitement une interface* $\Gamma = \{x \in \Omega \ / \ \phi_0(x) = 0\}$ *et telle que* $|\nabla\phi_0| \neq 1$, *déterminer la fonction* ϕ *telle que* $\Gamma = \{x \in \Omega \ / \ \phi(x) = 0\}$ *et* $|\nabla\phi| = 1$.

Le point essentiel étant évidemment de ne pas modifier la position de l'interface au cours de cette procédure.

Les problèmes induits par les distorsions de ϕ, au cours de la résolution de $\phi_t + \mathbf{v}.\nabla\phi = 0$, sont variés :

- le calcul de l'épaisseur *numérique* de l'interface, basé sur l'hypothèse que $|\nabla\phi| = 1$, devient erroné ;
- la tension de surface est donnée par la courbure de Γ dont le calcul est affecté par la présence de gradients trop forts ou trop faibles ;
- la masse est moins bien conservée, de même que la forme des interfaces.

La communauté Level Set s'est donc intéressée aux techniques de réinitialisation. La distance signée D associée à la fonction ϕ est classiquement définie par :

$$D(x) = \min_{y\in\Gamma} |x-y| \mathrm{sgn}(\phi(x)) \tag{4.1}$$

Il existe plusieurs manières de réinitialiser ϕ à D. Une approche naturelle consiste à discrétiser Γ et utiliser la définition de D. Lorsque l'on dispose précisément de la position de Γ, le calcul obtenu est lui même rigoureux. En revanche, dans une approche Level Set, cette méthode est peu commode car elle demande de retrouver la position précise de Γ : le coût de calcul est élevé et l'extension en trois dimensions est fastidieuse. Il existe néanmoins des implémentations rapides basées sur cet algorithme et des tris par tas [2] [162] [163].
En utilisant un résultat de Rouy et Tourin [132], Sussman *et al.* [169] (1994) introduisirent une autre méthode consistant à résoudre l'équation

$$\phi_t + \mathrm{sgn}(\phi_0)\,(|\nabla\phi| \; - \; 1) = 0 \tag{4.2}$$

qui, dans le cadre des méthodes Level Set, est appelée *équation de réinitialisation* (ou *redistanciation*). Elle est assortie de la condition initiale $\phi(x, t=0) = \phi_0(x)$ et la fonction signe est définie par :

$$\mathrm{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad x > 0 \\ 0 & \text{si} \quad x = 0 \\ -1 & \text{si} \quad x < 0 \end{cases} \tag{4.3}$$

Lorsque l'on résoud cette équation jusqu'au temps T, $\phi(x,T)$ est la distance signée à l'interface pour tous les points situés à une distance inférieure ou égale à T de Γ. Sachant que $\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}$ et en posant $\mathbf{w} = \mathrm{sgn}(\phi_0)\mathbf{n}$, on peut réécrire (4.2) sous la forme :

$$\phi_t + \mathbf{w}.\nabla\phi = \mathrm{sgn}(\phi_0) \tag{4.4}$$

qui n'est autre qu'une équation de transport à la vitesse $\mathrm{sgn}(\phi_0)\mathbf{n}$. L'information se propage dans la direction normale, des valeurs faibles de ϕ vers les valeurs fortes (en module) de part et d'autre de l'interface (voir Figure 4.1). Il apparaît donc qu'aucune condition aux limites n'est nécessaire sur les bords du domaine de calcul puisque l'information est issue de l'interface.

De plus, la définition de la fonction signe permet bien de maintenir la fonction ϕ à 0 aux points où $\phi_0 = 0$. Lors des calculs, cette fonction est lissée sur quelques mailles (en général, 2 à 3) et doit absolument conserver la propriété " $\mathrm{sgn}(0) = 0$ ". Par exemple, dans [169], les auteurs prennent :

$$\mathrm{sgn}(x) = \frac{x}{\sqrt{x^2 + (\Delta x)^2}} \tag{4.5}$$

La méthode de Sussman *et al.* a été introduite pour traiter de manière globale la propagation des informations de part et d'autre de l'interface. En effet, en utilisant directement l'approche de Rouy et Tourin, il faut calculer en deux temps : les zones où $\phi > 0$ puis celles où $\phi < 0$; il est alors nécessaire de fixer une bande de points adjacents à l'interface et de fournir des conditions aux limites consistantes pour que la ligne de niveau 0 ne soit pas modifiée au cours de la résolution de l'EDP. Ce point est d'autant plus névralgique lorsque l'on utilise

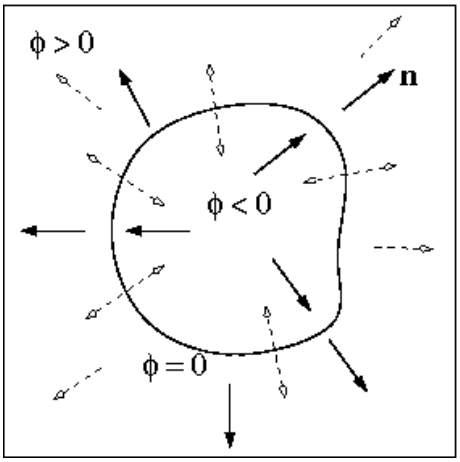


FIG. 4.1 – Propagation de l'information lors de la redistanciation (flèches en tirets) et normales aux lignes de niveau de ϕ (flèches en gras)

des schémas à stencil étalé qui nécessitent de connaître plusieurs rangées de points au-delà de l'interface pour imposer des conditions aux bords correctes.

Cependant, malgré son caractère unitaire, l'équation de redistanciation peut déplacer l'interface initiale. En effet, elle est classiquement discrétisée avec des schémas ENO ou WENO, utilisés sur tout le domaine. En particulier, le calcul des $\phi > 0$ se fait à l'aide des $\phi < 0$ et réciproquement. Il en résulte que les valeurs de ϕ au niveau de l'interface oscillent sans cesse autour de la valeur $\phi = 0$: la procédure n'atteint pas d'état stationnaire et la position du front est modifiée. Cet effet est encore plus accentué lorsque ϕ_0 n'est pas proche d'une fonction distance. Plusieurs auteurs ont relevé ce type de problème (*cf.* [115] et les références mentionnées). L'une des approches suggérées consiste à introduire des fonctions signe discrètes plus aplaties en 0 de manière à ce que la propagation de l'information fluctuante reste localisée (et soit ralentie) au niveau de l'interface (puisque sgn intervient dans la vitesse de propagation du signal $\mathbf{w} = \mathrm{sgn}(\phi_0)\mathbf{n}$). Ceci joue positivement dans la stabilisation des oscillations "autour" de la donnée initiale.
Peng *et al.* [118] (1999) raffinèrent cette approche en proposant le choix suivant pour sgn :

$$\mathrm{sgn}(d) = \frac{d}{\sqrt{d^2 + |\nabla d|^2 (\Delta x)^2}} \tag{4.6}$$

allié à une équation de redistanciation modifiée qui réactualise en permanence $\mathrm{sgn}(d)$

$$\begin{cases} d_t + \mathrm{sgn}\,(d)\ (|\nabla d| - 1) = 0 \\ d(x,0) = \phi_0 \end{cases} \tag{4.7}$$

Ce choix se justifie d'autant plus que la fonction à redistancier est de mauvaise qualité (au sens où $|\nabla \phi_0|$ est vraiment différent de 1).

4.2 Discrétisation réellement upwind

Ensuite, Russo et Smereka [134] (2000) apportèrent une contribution décisive pour stabiliser la résolution de l'équation de redistanciation. Nous décrivons leur approche dans ce qui suit.

Dans [134], les auteurs illustrent tout d'abord, en une dimension, que la méthode donnée dans [169], peut, sous certaines conditions, provoquer un déplacement de l'interface vers le nœud de calcul le plus proche. Ce phénomène est simplement dû au fait que les méthodes upwind utilisées ne sont pas réellement *upwind*. En effet, même un schéma d'ordre un, réalise des différences finies avec des points de part et d'autre de l'interface, ce qui est en désaccord avec les directions de propagation de l'information que nous avons décrites précédemment. Lorsque l'on utilise un point d'un côté de l'interface, pour le calcul d'un point de l'autre côté, on injecte de l'information qui n'a pas à traverser la frontière. Russo et Smereka proposent alors une méthode pour modifier le schéma de [169] de telle sorte qu'il soit réellement *upwind*.

Plus précisément, la version 1D du schéma utilisé par Sussman *et al.* est la suivante :

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \Delta t \ \mathrm{sgn}\ (\phi_i^0) G(\phi)_i \tag{4.8}$$

avec sgn défini par (4.5) et

$$G(\phi)_i = \begin{cases} \max(|a_+|, |b_-|) - 1 & \text{si} \quad \phi_i^0 > 0 \\ \max(|a_-|, |b_+|) - 1 & \text{si} \quad \phi_i^0 < 0 \end{cases} \tag{4.9}$$

où l'on note

$$a := D_x^- \phi_i \quad = \quad (\phi_i - \phi_{i-1})/\Delta x \tag{4.10}$$

$$b := D_x^+ \phi_i \quad = \quad (\phi_{i+1} - \phi_i)/\Delta x \tag{4.11}$$

Enfin, on a la notation classique $f_+ = \max(f, 0)$ et $f_- = \min(f, 0)$ pour tout réel f.

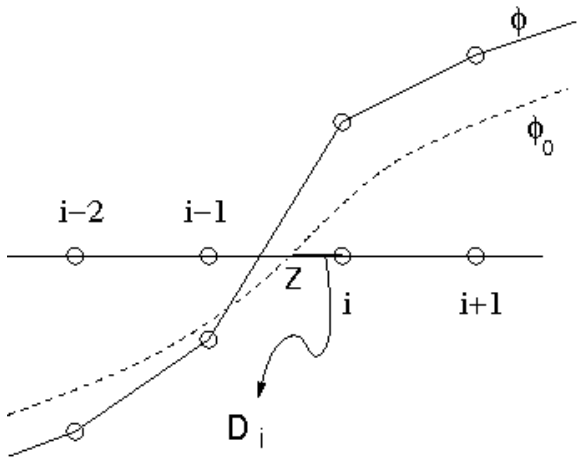


FIG. 4.2 – Construction d'un schéma upwind

Russo et Smereka utilisent le même schéma en ne modifiant que le calcul de G et de sgn pour les points qui sont à une maille de l'interface. Pour G, ils proposent :

$$G(\phi)_i = |D_x^{up} \phi_i| - 1 \tag{4.12}$$

où D_x^{up} est l'opérateur de dérivation réellement *upwind* en présence de l'interface. Il est obtenu par construction géométrique. Ainsi, sur la Figure 4.2, $D_x^{up}\phi_i = \phi_i / D_i$ où D_i est la distance signée calculée en utilisant la donnée initiale ϕ^0 (la distance entre le nœud i et le point Z, sur la figure). Cette formulation est basée sur la propriété de l'équation de redistanciation qui fait que les caractéristiques sont issues de l'interface. D'un point de vue générique, il vient :

$$D_x^{up}\phi_i = \begin{cases} \frac{\phi_i}{|D_i|} & \text{si} \quad \phi_i^0 \phi_{i-1}^0 < 0 \\ -\frac{\phi_i}{|D_i|} & \text{si} \quad \phi_i^0 \phi_{i+1}^0 < 0 \end{cases} \tag{4.13}$$

Le calcul de D_i peut, par exemple, s'obtenir *via* :

$$D_i = \Delta x \frac{2\phi_i^0}{|\phi_{i+1}^0 - \phi_{i-1}^0|} \tag{4.14}$$

Quant à la fonction signe, elle est donnée par :

$$S = \begin{cases} \frac{D_i}{\Delta x} & \text{si} \quad \phi_i^0\phi_{i-1}^0 \leqslant 0 \text{ ou } \phi_i^0\phi_{i+1}^0 \leqslant 0 \\ \text{sgn}(\phi_i^0) & \text{sinon} \end{cases} \tag{4.15}$$

En injectant ces modifications dans l'approche (4.8)-(4.9), on obtient le schéma :

$$\phi_i^{n+1} = \begin{cases} \phi_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(\text{sgn}(\phi_i^0)|\phi_i^n| - D_i) & \text{si} \quad \phi_i^0\phi_{i-1}^0 < 0 \text{ ou } \phi_i^0\phi_{i+1}^0 < 0 \\ \phi_i^n - \Delta t \text{ sgn }(\phi_i^0)G(\phi)_i & \text{sinon} \end{cases} \tag{4.16}$$

où $G(\phi)_i$ est donné par (4.9).

Les résultats montrent que cette méthode modifie très peu la position de l'interface et surtout que le déplacement est stationnaire quelque soit le temps d'évolution (en fait, l'interface se meut à la première itération et reste fixe pour toutes les suivantes).

Les auteurs s'intéressent ensuite aux interfaces en 2D. Le problème évoqué ci-dessus est encore plus prononcé puisque la procédure peut provoquer des pertes de masse et le rétrécissement de l'interface. Ils en donnent une illustration avec la donnée initiale suivante :

$$\phi^0(\mathbf{x}) = \sqrt{(x-5)^2 + (y-5)^2} - 4 \tag{4.17}$$

pour le schéma 2D d'ordre un présenté dans [169] :

$$\phi_{i,j}^{n+1} = \phi_{i,j}^n - \Delta t \text{ sgn }(\phi_{i,j}^0)G(\phi)_{i,j} \tag{4.18}$$

où

$$G(\phi)_{i,j} = \begin{cases} \sqrt{\max(|a_+|^2, |b_-|^2) + \max(|c_+|^2, |d_-|^2)} - 1 & \text{si} \quad \phi_{i,j}^0 > 0 \\ \sqrt{\max(|a_-|^2, |b_+|^2) + \max(|c_-|^2, |d_+|^2)} - 1 & \text{si} \quad \phi_{i,j}^0 < 0 \end{cases} \tag{4.19}$$

avec a et b donnés par la version 2D de (4.10), à l'image de :

$$c := D_y^- \phi_i = (\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1})/\Delta x \tag{4.20}$$

$$d := D_y^+ \phi_i = (\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j})/\Delta x \tag{4.21}$$

Les résultats du calcul d'évolution sont présentés sur la Figure 4.3. Le domaine de calcul est le carré Ω = [0,10]x[0,10]. Les paramètres numériques sont $\Delta x = 10/16$ et $\Delta t = \Delta x/2$. La ligne de niveau 0 pour la donnée initiale est affichée en bleu. Ce même contour est aussi dessiné pour le nombre d'itérations N_t = 160, 320, 480, 640, 800.

On peut noter deux problèmes, l'interface se déplace considérablement et elle présente une anisotropie due au maillage. Ces effets néfastes peuvent êtres atténués si l'on utilise des schémas d'ordre plus élevé. C'est ce que nous observons lorsque l'on utilise un schéma ENO d'ordre 2 (voir Figure 4.4) puis un schéma WENO d'ordre 5 (voir Figure 4.5).

Remarquons, par ailleurs, que le choix de la fonction signe discrète joue un rôle non négligeable, comme nous l'avons évoqué ci-dessus. Pour illustrer ce point, on présente les résultats obtenus avec le schéma WENO d'ordre 5 pour les deux choix de sgn suivants :

$$\text{sgn }(x) = \begin{cases} \frac{x}{|x|} & \text{signe “exact” (voir Figure 4.7)} \\ \frac{x}{\sqrt{x^2+\Delta x^2}} & \text{signe “lissé” (voir Figure 4.6)} \end{cases}$$

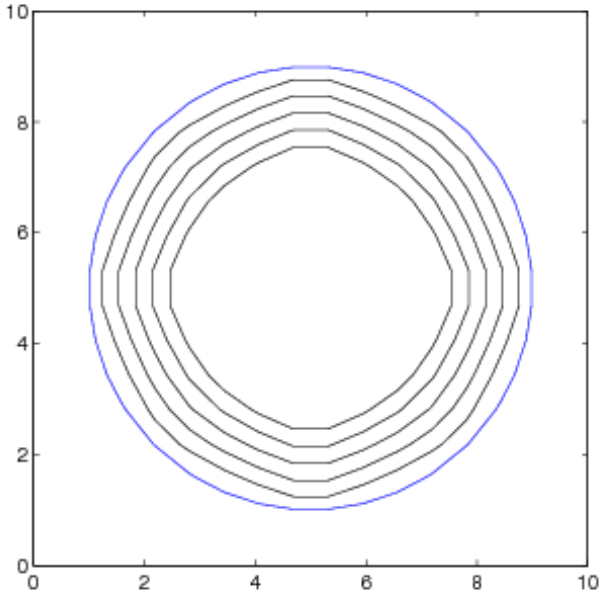


FIG. 4.3 – Schéma 2D non upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires)

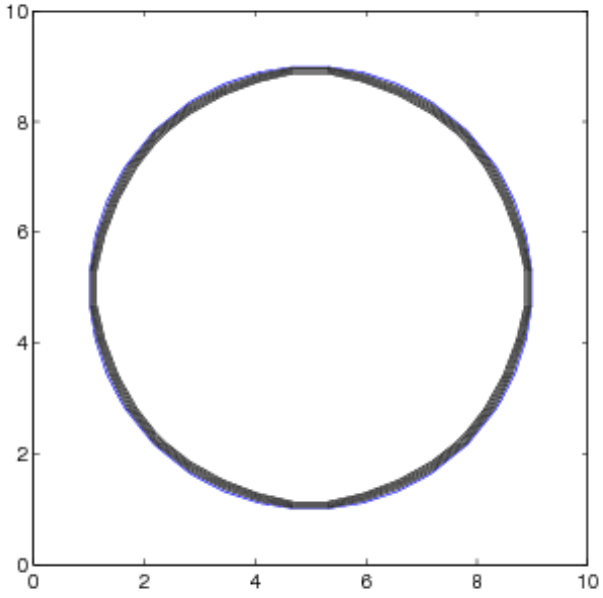


FIG. 4.4 – Schéma 2D non upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), ENO2

Le bilan de l'application directe de la méthode de redistanciation originelle fait ressortir qu'en 2D, l'algorithme induit des erreurs qui s'accumulent au cours des itérations en temps.

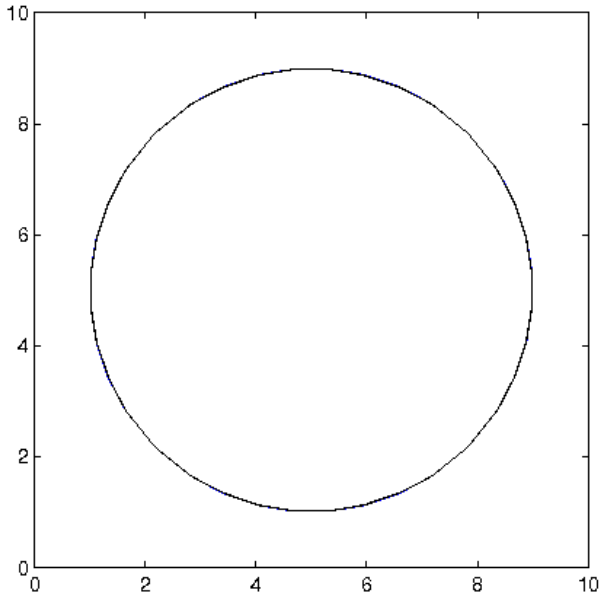


FIG. 4.5 – Schéma 2D non upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), WENO5

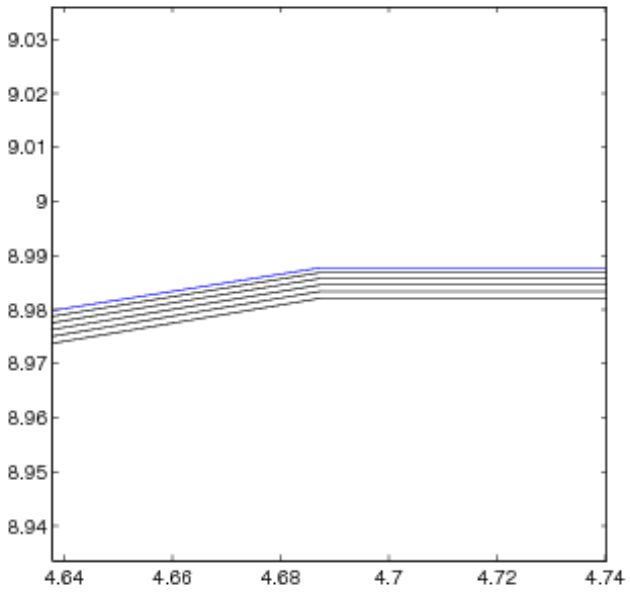


FIG. 4.6 – Schéma 2D non upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), WENO5 zoom, sgn lissé

Dans la perspective d'une utilisation périodique au cours du transport Level Set, cette approche est donc à proscrire car elle va accentuer les pertes de masse.

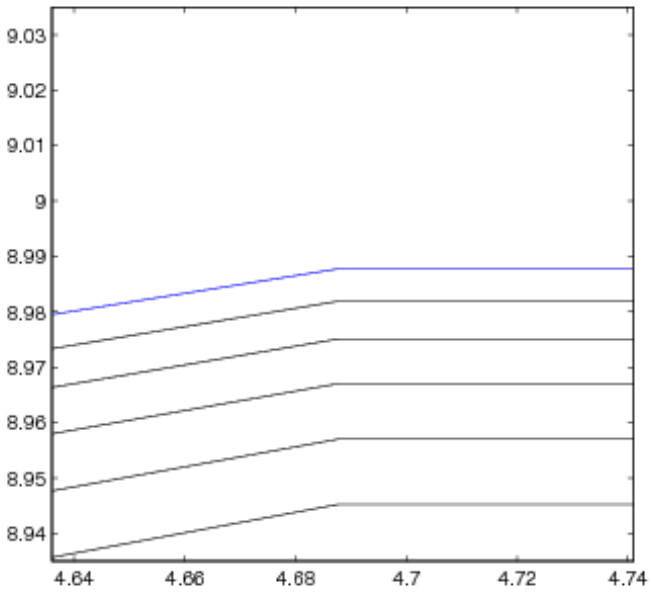


FIG. 4.7 – Schéma 2D non upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), WENO5 zoom, sgn exact

En étendant de manière directe leur schéma 1D au cas 2D, Russo et Smereka obtiennent une méthode dont l'erreur est indépendante du temps. Le schéma est le suivant :

$$\phi_{i,j}^{n+1} = \begin{cases} \phi_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(\text{sgn}(\phi_{i,j}^0)|\phi_{i,j}^n| - D_{i,j}) & \text{si} \quad (i,j) \in \Gamma_{\Delta x} \\ \phi_{i,j}^n - \Delta t \ \text{sgn}\ (\phi_{i,j}^0) G(\phi)_{i,j} & \text{sinon} \end{cases} \tag{4.22}$$

où $G(\phi)_{i,j}$ est donné par (4.19). On note $\Gamma_{\Delta x}$, l'ensemble des points qui sont situés à moins d'une maille de l'interface, *i.e.*

$$\Gamma_{\Delta x} = \{(i,j)/\phi_{i,j}\phi_{i-1,j} < 0 \text{ ou } \phi_{i,j}\phi_{i+1,j} < 0 \text{ ou } \phi_{i,j}\phi_{i,j-1} < 0 \text{ ou } \phi_{i,j}\phi_{i,j+1} < 0\} \tag{4.23}$$

En 2D, la distance $D_{i,j}$ du point (i,j) à l'interface est donnée par :

$$D_{i,j} = \frac{2\Delta x\, \phi_{i,j}^0}{\sqrt{(\phi_{i+1,j}^0 - \phi_{i-1,j}^0)^2 + (\phi_{i,j+1}^0 - \phi_{i,j-1}^0)^2}} \tag{4.24}$$

Les figures suivantes présentent les résultats obtenus en appliquant ce schéma au cas du cercle précédent. Les paramètres numériques et les itérés affichés sont les mêmes qu'auparavant. La Figure 4.8 montre que, à l'échelle du domaine de calcul, les lignes de niveau 0 sont superposées. Pour comparer avec la méthode originelle, la Figure 4.9 est un zoom sur le même cadre que la Figure 4.6. Il ressort que la position du front est plus précise que celle obtenue avec le schéma d'ordre 5 qui n'est pas *upwind*. Pour discerner une différence entre la donnée initiale et les itérés, il faut accroître le zoom comme le montre la Figure 4.10. Une nouvelle fois, on constate que la méthode induit une erreur à la première itération (associée au calcul de $D_{i,j}$) mais qu'ensuite, cette erreur est stationnaire : les lignes de niveau 0 ultérieures sont superposées à celle de la première itération.

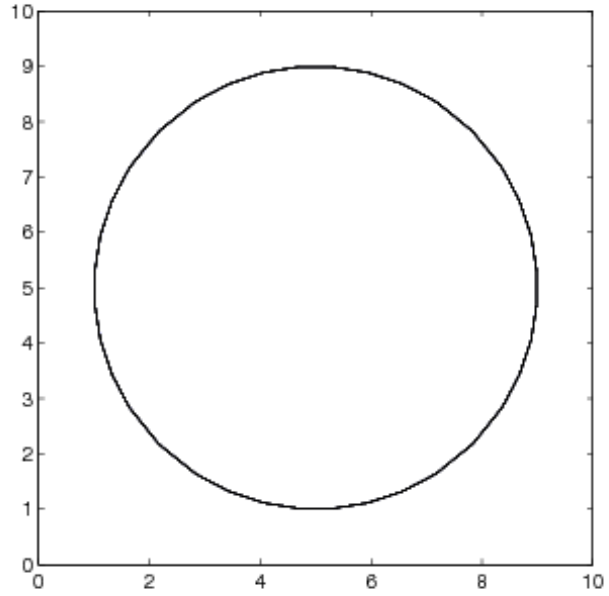


FIG. 4.8 – Schéma 2D upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires)

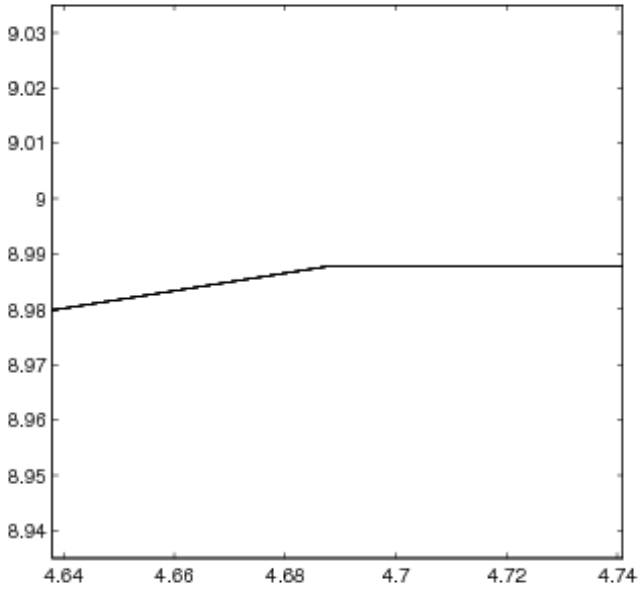


FIG. 4.9 – Schéma 2D upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), zoom pour comparer avec la Figure 4.6

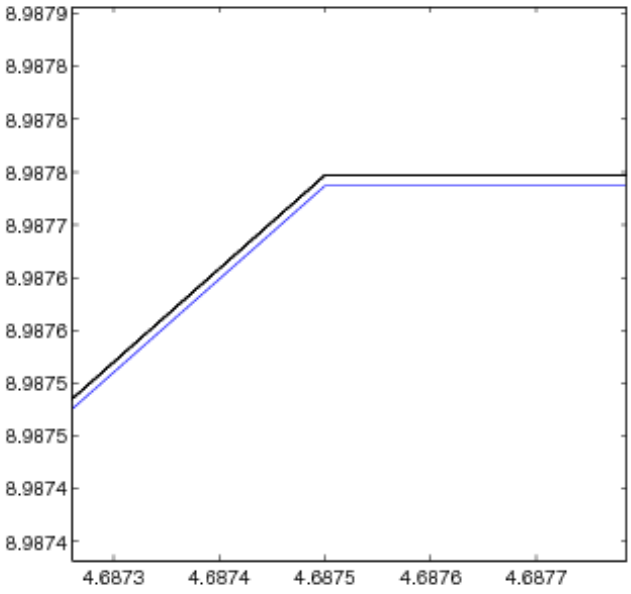


FIG. 4.10 – Schéma 2D upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), zoom accentué pour discerner les itérés

Le cas test du cercle ci-dessus montre que la méthode de Russo et Smereka améliore considérablement les résultats. On va maintenant tester des exemples plus pathologiques. Considérons tout d'abord le cas d'une donnée initiale elliptique :

$$\phi^0(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{(x-5)^2}{A^2} + \frac{(y-5)^2}{B^2}} - 1 \tag{4.25}$$

avec $A = 4$ et $B = 2$. On reprend les mêmes paramètres numériques : $\Delta x = 10/16$ et $\Delta t = \Delta x/2$. Dans ce cas, $|\nabla \phi_0| \neq 1$ mais les gradients sont faiblement variables. On constate, sur la Figure 4.11, que la nouvelle méthode reste efficace (même si, à l'œil, c'est un peu moins bon que pour le cercle).

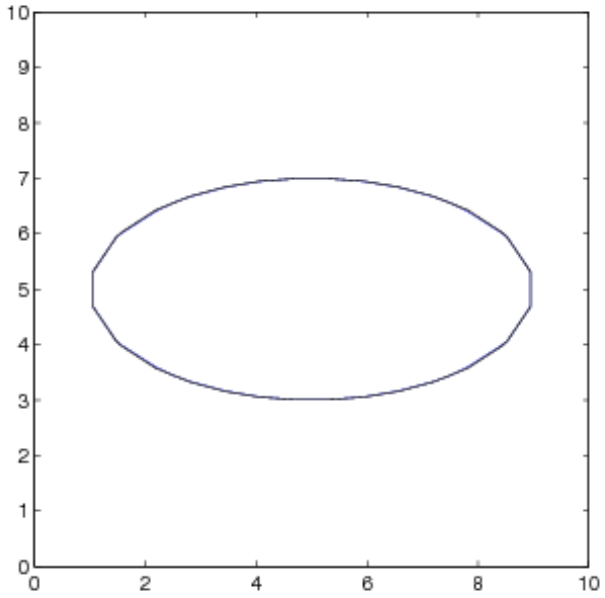


FIG. 4.11 – Schéma 2D upwind pour la redistanciation : donnée initiale elliptique (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires)

Ensuite, on teste un cas plus rude en perturbant l'ellipse. La donnée initiale est la suivante :

$$\phi^0(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) \left(\sqrt{\frac{(x-5)^2}{A^2} + \frac{(y-5)^2}{B^2}} - 1 \right) \tag{4.26}$$

où

$$f(\mathbf{x}) = \epsilon + (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 \tag{4.27}$$

avec $\epsilon = 0.1$, $x_0 = 1.5$, $y_0 = 3$. La Figure 4.12 montre quelques isos de ϕ^0. Le calcul est toujours mené jusqu'à $N_t = 800$. On remarque que, pour cette donnée initiale qui présente des zones à forts et faibles gradients, le résultat de la redistanciation est moins bon : les interfaces des itérés sont clairement différentes de l'interface initiale (figure 4.13). Cependant, l'erreur est une nouvelle fois indépendante du temps : les interfaces successives sont superposées. La Figure 4.14 montre quelques isos de ϕ obtenu pour $N_t = 800$.

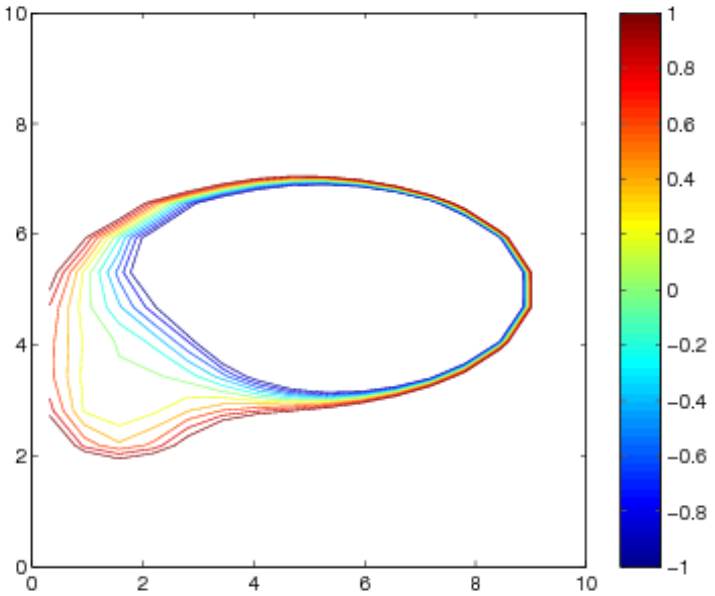


FIG. 4.12 – Lignes de niveau (de -1 à 1 par pas de 0.2) de la donnée initiale elliptique perturbée (maillage 16x16)

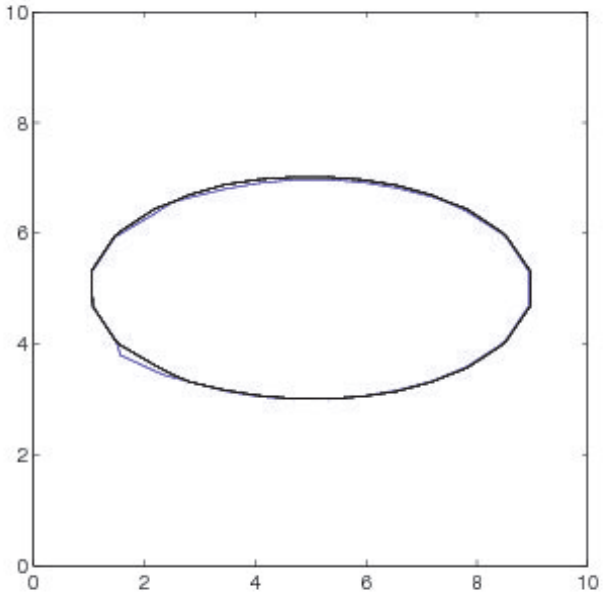


FIG. 4.13 – Schéma 2D upwind pour la redistanciation : donnée initiale elliptique perturbée (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), zoom

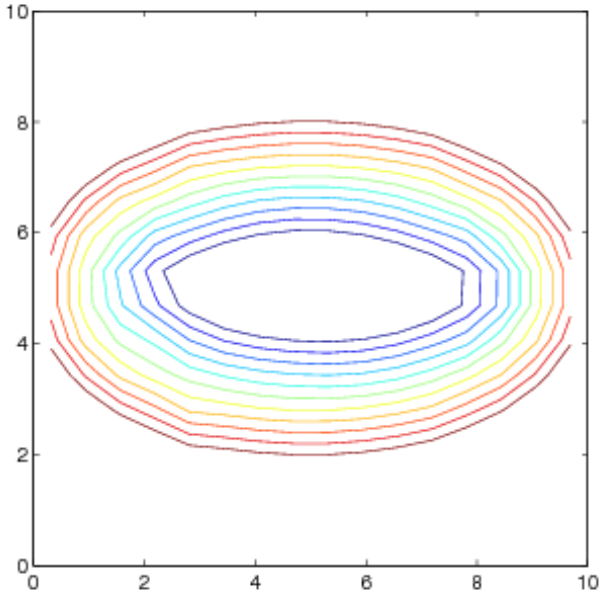


FIG. 4.14 – Lignes de niveau (de -1 à 1 par pas de 0.2) du 800^e itéré pour la donnée initiale elliptique perturbée

Ce cas test est présenté par Russo et Smereka mais avec $\Delta x = 10/200$. Evidemment, en raffinant le maillage, les résultats sont meilleurs, comme le montre la Figure 4.15.

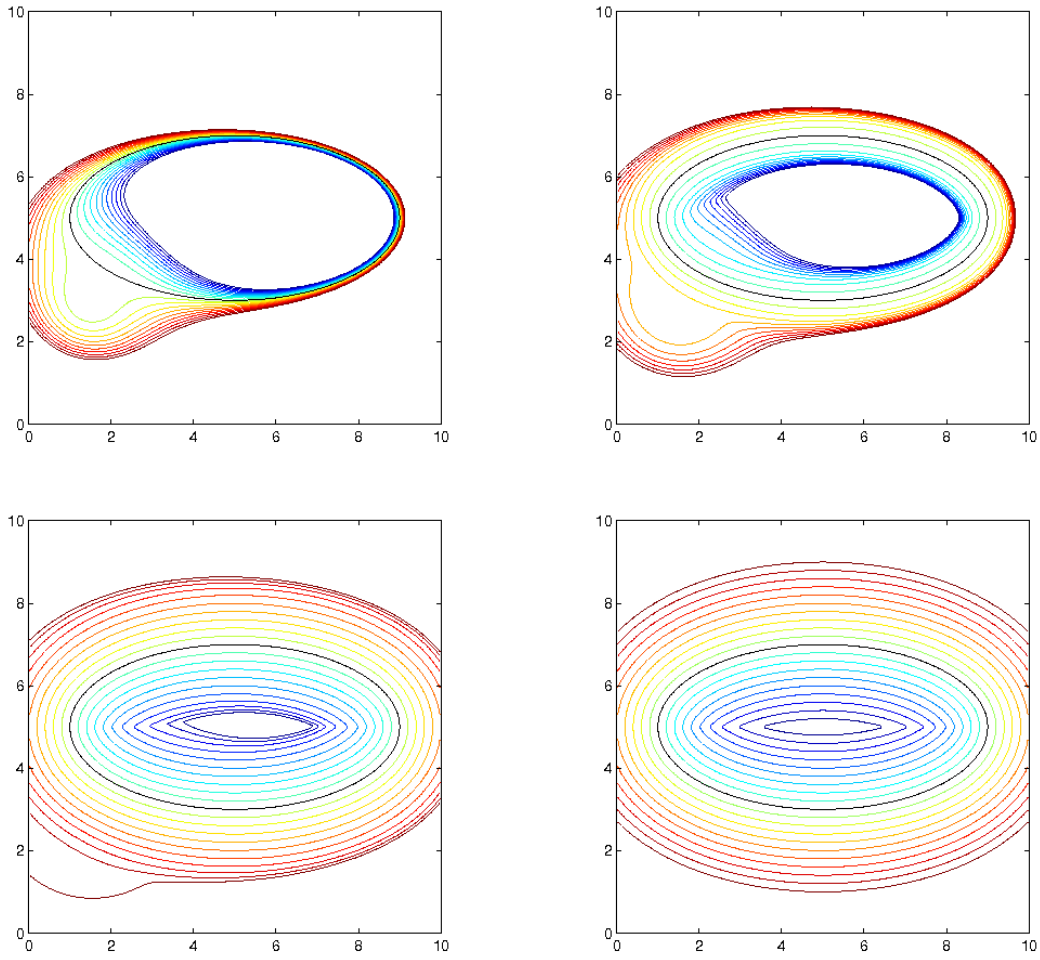


FIG. 4.15 – Lignes de niveau (de -2 à 2 par pas de 0.2) pour $N_t = 0$, 50, 150, 250 avec la donnée initiale elliptique perturbée (dont l'iso-0 est affichée en noir sur les 4 graphes) ; $\Delta x = 10/200$ et $\Delta t = \Delta x/4$

Le calcul de l'erreur L^1 permet de mettre en évidence qu'elle est bornée sans dépendance avec le nombre d'itérations. On mesure la quantité suivante :

$$\| \phi^n - D \|_1 = \sum_{i,j} |\phi^n_{i,j} - D(\mathbf{x}_{i,j})| \Delta x^2 \tag{4.28}$$

où $D(\mathbf{x}_{i,j})$ est une approximation précise de la distance signée exacte, calculée par :

$$D(\mathbf{x}_{i,j}) = \min_{1 \leqslant p \leqslant N_\Gamma} |\mathbf{x}_{i,j} - \mathbf{x}_p| \mathrm{sgn}(\phi(\mathbf{x}_{i,j})) \tag{4.29}$$

en notant $\mathbf{x}_p$, un point situé exactement sur l'interface. On dispose, pour une ellipse, d'une expression analytique donnant ces N_Γ points $\mathbf{x}_p = (x_p, y_p)$:

$$x_p = A\cos(2\pi p/N_\Gamma) \quad \text{et} \quad y_p = B\sin(2\pi p/N_\Gamma) \tag{4.30}$$

En suivant [134], on a calculé (4.28) pour le cas de l'ellipse perturbée, avec des maillages 50x50, 100x100, 200x200 en utilisant leur méthode réellement *upwind*. Pour la méthode originelle, on présente seulement le résultat qui utilise un maillage 200x200. L'approximation (4.29)

a été obtenue en utilisant $N_\Gamma = 2000$ points. La Figure 4.16 montre l'évolution de l'erreur L^1 au cours du temps pour ces quatre calculs. Il est désormais clair que la nouvelle méthode permet d'obtenir une erreur stationnaire, contrairement à la méthode originelle dont l'erreur augmente au cours du temps. De plus, on constate que la méthode de Russo et Smereka est réellement d'ordre un.

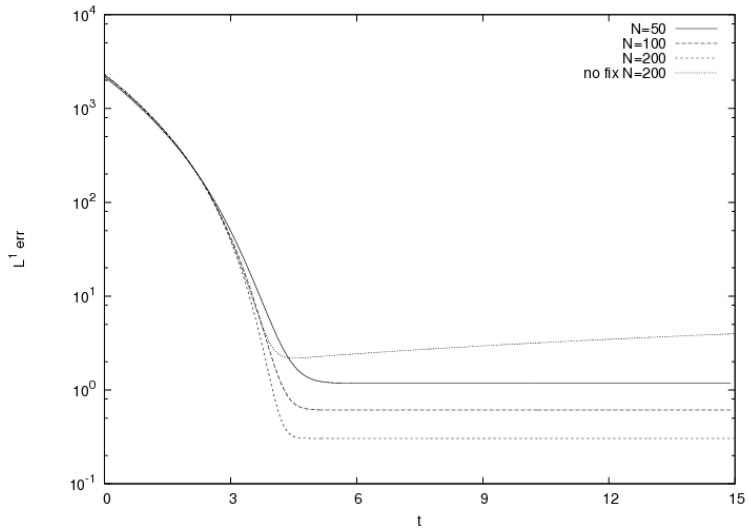


FIG. 4.16 – Erreur L^1 au cours du temps, pour différents maillages et méthodes

Mais les auteurs ne s'arrêtent pas là puisqu'ils proposent, de plus, une extension de cette philosophie pour obtenir des schémas d'ordre deux (en utilisant une discrétisation ENO2 et un calcul de D_i via une interpolation $\mathbb{P}3$). Pour la description complète, on se reportera à [134].

En résumé, dans cet article, Russo et Smereka ont mis à jour le point clé d'une résolution numérique précise de l'équation de redistanciation et posé les bases pour la montée en ordre. En particulier, dans les présents travaux, nous avons utilisé cette méthode de discrétisation réellement *upwind* alliée aux schémas (W)ENO.

Remarque 4.1 : Application à l'extension des vitesses

Au chapitre 2, nous avons évoqué l'utilisation de l'équation d'*extension des vitesses*, suivant la direction normale à l'interface. En fait, pour étendre une quantité scalaire ξ, selon la direction des caractéristiques issues de l'interface (définie par la fonction ϕ à laquelle on associe le champ de normales $\mathbf{n} = \nabla\phi/|\nabla\phi|$), il suffit de résoudre l'équation suivante :

$$\xi_t \; + \; \mathrm{sgn}(\phi)\,\mathbf{n}\,.\,\nabla\xi = 0 \tag{4.31}$$

inspirée des propriétés de transport de l'information illustrées sur la Figure 4.1. On peut donc aussi utiliser les techniques de discrétisation "truly upwind" présentées précédemment pour résoudre numériquement ce problème. Ainsi, si l'on considère l'exemple particulier où l'on doit étendre la trace sur l'interface d'un champ de vitesse $\mathbf{v} = (u, v, w)$, dans tout le domaine, il suffit de résoudre les trois problèmes (4.31) induits par les données initiales $\xi(t = 0) = \{u, v, w\}$. Une fois l'état asymptotique atteint sur tout le domaine de calcul, on dispose d'un nouveau champ de vitesse étendue $\mathbf{v}_{ext} = (u, v, w)_{ext}$.

Remarque 4.2 : Deux autres méthodes de redistanciation

Par ailleurs, il convient de mentionner l'approche de Sussman et Fatemi [166] dont l'esprit est tout à fait différent puisqu'elle consiste à contraindre la conservation de la masse lors de la résolution de l'équation de redistanciation. Au lieu d'agir uniquement sur la discrétisation comme l'ont fait Russo et Smereka, ils rajoutent un terme dans l'équation qui permet de conserver localement la masse, palliant ainsi les errances, connues et illustrées sur la Figure 4.3, de la méthode de résolution classique. Concrètement, ils modifient l'équation de la manière suivante :

$$\phi_t + \mathrm{sgn}(\phi_0)\,(|\nabla\phi| \; - \; 1) = \lambda f(\phi) \tag{4.32}$$

puis exigent que le volume contenu dans l'interface sont invariant en temps, *i.e.*

$$\partial_t \int_\Omega H(\phi) = 0. \tag{4.33}$$

De manière à ce que ce terme supplémentaire ne corrige le volume que près de l'interface, ils prennent $f(\phi) \; = \; H'(\phi)\,|\nabla\phi|$, ce qui conduit à

$$\lambda = \frac{-\int_\Omega H'(\phi)\mathrm{sgn}(\phi_0)\,(1 \; - \; |\nabla\phi|)}{\int_\Omega H'(\phi) f(\phi)} \tag{4.34}$$

D'un point de vue pratique, les intégrales de (4.34) sont calculées avec une formule de quadrature à neuf points.
Si (4.2) était parfaitement résolue, on aurait $\lambda = 0$. Mais numériquement, cela n'est plus vrai et l'idée de [166] consiste à forcer la conservation du volume dans chaque cellule $\Omega_{i,j}$ du maillage. Notons qu'en ce sens, puisqu'il est possible de conserver le volume tout en déplaçant la position de l'interface, cette contrainte conduit à des résultats plus faibles que ceux des approches visant à être précis sur la discrétisation de (4.2). En particulier, c'est ce que l'on constate sur les résultats numériques présenté dans cet article : la conservation de la masse – en utilisant cette méthode de concert avec un schéma ENO3 – est probante et comparable aux résultats obtenus avec un schéma WENO5 sans redistanciation (*cf.* Figures 5-7 de [166] et comparer avec les Figures 3.24 et 3.25 du présent manuscrit) ; on remarque tout de même que la position de l'interface est décalée de manière non symétrique, ce qui n'est pas le cas de l'approche WENO5. Il convient de préciser que la comparaison entre ces deux tests a du sens car le champ de vitesse tournant utilisé ne modifie pas la fonction distance (d'un point de vue théorique), par conséquent les deux approches résolvent le même problème continu. Ainsi, cette conservation imposée de la masse peut ici conduire à des positions artificielles du front. Cette méthode est néanmoins performante et, couplée avec des schémas WENO5, elle doit pouvoir donner de meilleurs résultats qu'un transport WENO5 sans redistanciation. Un nouvelle fois, ayant déjà la précision requise pour nos applications, nous n'avons pas développé cette méthode dont l'implémentation est moins directe.

Enfin, une méthode élégante vient tout juste d'être introduite par Cheng et Tsai dans [26]. L'idée met en jeu la résolution de deux équations eikonales d'évolution et permet d'obtenir des résolutions d'ordres élevés pour la redistanciation et l'extension de valeurs depuis l'interface.

Au chapitre 2, nous avons déja évoqué les méthodes *Fast Marching* comme étant une approche rapide pour redistancier. Nous allons maintenant les décrire plus en détail.

4.3 Méthode Fast Marching

Il s'agit ici de réaliser un changement de point de vue. Dans les sections précédentes, le problème de redistanciation est traité à l'aide d'une EDP d'évolution. Un champ initial ϕ est tranformé en une fonction distance par calculs successifs traduisant sa modification au cours du temps (il s'agit, bien sûr, d'un temps de relaxation plus que d'un temps physique). Si la méthode numérique est fiable, sachant que le domaine de calcul est borné, il existe un temps fini pour lequel ϕ atteint un état asymptotique correspondant à la distance signée. En d'autres termes, tous les points du domaine seront recalculés tant que l'asymptotique désirée par l'utilisateur n'aura pas été atteinte (au sens, où l'on peut choisir de ne redistancier que dans une zone au voisinage de l'interface et pas sur tout le domaine de calcul : la distance signée se propage à vitesse un, si bien qu'il suffit d'un temps $t_d = d$ pour réactualiser les points situés à une distance d du front) ; bien évidemment, pour les points qui sont déjà affectés de la distance signée, ce recalcul donne la même valeur : c'est en remarquant cette redondance que l'on chemine vers l'idée des méthodes *Fast Marching*. Elles consistent à imiter la nature hyperbolique (pensons, de nouveau, à la Figure 4.1) de ce problème en réalisant un calcul de la distance des points des valeurs faibles (*i.e.* proches du zéro de l'interface) vers les valeurs élevées (en module) ; autrement dit, à propager la distance depuis l'interface vers les zones lointaines mais avec l'astucieux souci de ne pas recalculer les points contenant la valeur solution. Cela constitue le premier gain de temps induit par cette approche.

Plus précisément, il s'agit de résoudre le problème suivant. On suppose que l'on dispose d'un champ de référence ϕ^R qui n'est pas une distance signée mais définit implicitement une interface Γ sur un domaine de calcul Ω. On veut déterminer ϕ solution de l'équation eikonale :

$$\begin{cases} |\nabla\phi| = 1 \quad \forall x \in \Omega \\ \phi = 0 \text{ sur } \Gamma \text{ donné} \end{cases} \tag{4.35}$$

Au sein de la communauté Level Set, cette idée et la méthode de résolution numérique ont été présentées par Sethian en 1996 dans [143]. Les ingrédients algorithmiques mis en jeu sont aussi mentionnés peu avant par Tsitsiklis dans [180] et sont inspirés par la méthode de Dijkstra : elle permet de trouver le plus court chemin sur un réseau discret dont les liens entre chaques points du maillage sont affectés d'un "coût" de passage – le but étant d'aller d'un point A à un point B par la voie la plus économe. Les travaux susnommés étendent l'algorithme de Dijkstra au calcul de la fonction distance.

Dans la suite, nous allons décrire la méthode *Fast Marching* en suivant le propos de [143] (on pourra aussi se référer à [145] et [115]). Sethian suggère d'utiliser un schéma de l'article de Rouy et Tourin [132], pour discrétiser (4.35) ; à savoir :

$$\max(\max(D_x^- \phi_{ij}, 0)^2, \min(D_x^+ \phi_{ij}, 0)^2) + \max(\max(D_y^- \phi_{ij}, 0)^2, \min(D_y^+ \phi_{ij}, 0)^2) = 1 \tag{4.36}$$

où, classiquement, $D_x^- \phi_{ij} = (\phi_{ij} - \phi_{i-1,j})/\Delta x$, $D_x^+ \phi_{ij} = (\phi_{i+1,j} - \phi_{ij})/\Delta x$ et de même pour les dérivées dans la direction y.

La nature de la fonction ϕ, dans un cadre Level Set, et la donnée de l'interface Γ pour résoudre le problème (4.35) nous permettent de scinder sa résolution en deux étapes du même type :

- on dispose d'un ensemble de points adjacents à Γ qui vont servir de "camp de base" pour démarrer la résolution et propager le calcul vers les zones éloignées ;
- sous réserve d'une initialisation consistante de ces points de référence, la distance calculée sera correcte ;

– on peut donc commencer, par exemple, par calculer la *distance positive* dans la direction normale avec l'algorithme *ad hoc* puis, dans une deuxième étape, utiliser ce même algorithme pour déterminer la *distance négative*, de l'autre côté de l'interface.

Pour cela, il suffit de multiplier ϕ par -1 à la fin de la première étape, d'appliquer l'algorithme pour la distance positive et enfin de récupérer la solution en remultipliant par -1. Aussi, allons-nous décrire la méthode pour construire la distance positive à l'interface, en supposant que l'on dispose d'un ensemble de points fiables qui permettent d'initier le calcul.

L'idée centrale sur laquelle repose la méthode *Fast Marching* a été évoquée plus haut : la structure du schéma (4.36) implique que l'information se déplace à "sens unique" des valeurs de ϕ les plus faibles aux valeurs les plus grandes. L'algorithme *Fast Marching* fait donc en sorte de construire la solution depuis le lieu des points où ϕ prend ses valeurs minimales. Dans ce but, le domaine de calcul est partitionné en trois sous-ensembles (*cf.* Figure 4.17) :

– **Known**, noté K, qui est l'ensemble des points où les valeurs de ϕ sont connues ;
– **Narrow Band**, noté NB, qui est l'ensemble des points où les valeurs de ϕ sont inconnues et dont la distance à K est inférieure ou égale au pas d'espace ;
– **Far**, noté F, qui est l'ensemble des points qui ne sont ni dans K ni dans NB.

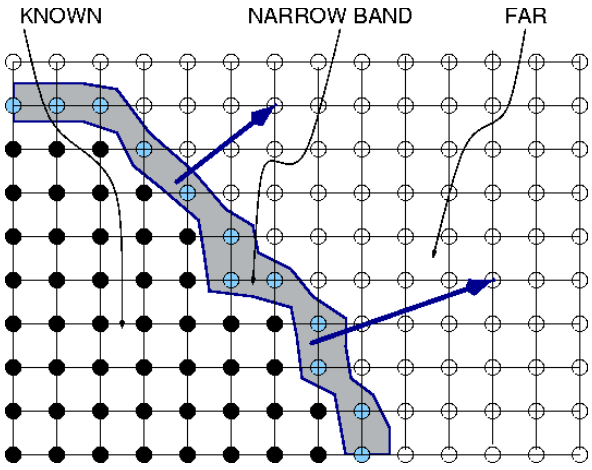


FIG. 4.17 – Partitionnement du domaine de calcul pour la méthode *Fast Marching*. Les flèches bleues (en trait épais) indiquent le sens de propagation de la Narrow Band.

L'idée générale consiste alors à calculer ϕ pour les points de la Narrow Band puis à les inclure dans Known et à ajouter leurs voisins non calculés dans la Narrow Band. Ainsi, la zone de calcul de la Narrow Band se propage en coïncidence avec l'évolution du front distinguant les noeuds en lesquels ϕ est solution de (4.35). L'algorithme se compose d'une phase d'initialisation et d'une phase itérative dont les étapes sont les suivantes :

Phase d'initialisation

– pour tous les points $(i;j)$ de Known $\phi(i;j)$ contient la valeur de la distance à l'interface ;
– on stocke les points de la NB dans une structure de données adaptée et on calcule les points de NB par résolution de l'équation quadratique induite par (4.36) ;
– On affecte la valeur $+\infty$ en machine à $\phi(i;j)$ pour tous les points $(i;j)$ de Far.

Phase itérative : "déplacement de la Narrow Band"

Début de boucle
- Détermination du point $P_m = (i_{min}, j_{min})$ de NB tel que
  $\phi(i_{min}, j_{min}) = \min_{(i;j)\in NB} \ \phi(i;j)$
  et ajout de ce point dans Known / suppression de la NB ;
- Marquage des voisins de P_m, ajout éventuel dans la NB si le voisin est dans Far ;
- Calcul de la valeur de ϕ en ces voisins marqués par résolution de l'équation quadratique induite par(4.36)

Fin de boucle

Il est fondamental de calculer les points dans l'ordre des valeurs de ϕ croissantes pour que la résolution effectuée à l'aide du schéma (4.36) produise une approximation consistante du problème (4.35). Sethian propose ainsi une preuve constructive en montrant que grâce à l'algorithme précédent, chaque point admis dans la zone Known, c'est-à-dire étant solution du problème (4.35), l'est par ordre croissant des ϕ. La démonstration est la suivante.

Preuve :

Comme les valeurs de $\phi(x, y)$ sont déterminées en partant de la plus petite valeur et en calculant ensuite les valeurs croissantes, il suffit de montrer que, à chaque fois qu'une valeur de la Narrow Band est convertie en Known, aucun des voisins recalculés ne se voit affecté une valeur de ϕ inférieure à la valeur convertie du point central.
Si cette assertion est vraie, chaque valeur recalculée aura donc une valeur supérieure et la nature de la propagation de l'information – des valeurs les plus faibles aux valeurs les plus fortes – du schéma numérique (4.36) est respectée.
Pour cela, on considère la configuration de points du maillage de la Figure 4.18.

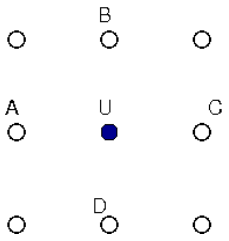


FIG. 4.18 – Configuration des points du maillage pour le calcul de ϕ au point U

On suppose, sans perdre de généralité, que le point A est le minimum de la Narrow Band. C'est donc ce point A qui entraîne le calcul de ϕ au point labélisé U sur la figure ci-dessus.
Nous allons montrer que, quel que soit le nombre de voisins connus (au sens où ϕ y a déjà été calculé) de U, la valeur calculée pour ϕ en U ne peut pas être inférieure à A (on confond ici point du maillage et valeur de ϕ en ce point).
Il existe quatre cas possibles pour la nature des voisins B, C et D :
- 1er cas : aucun de ces trois n'est dans Known
- 2^{e} cas : l'un des trois seulement est dans Known
- 3^{e} cas : deux sont dans Known
- 4^{e} cas : les trois sont dans Known.

Traitons ces cas successivement.

- **1er cas**
  B, C et D ne sont pas dans Known, A est le minimum de la Narrow Band. Donc on

ajoute A dans Known, on le supprime de la Narrow Band et on recalcule la valeur de ϕ en U.

Montrons que $A \leq U \leq A + \Delta x$

1. Supposons que $A + \Delta x < \min(B, D)$. Du fait que, dans ce cas, le seul opérateur de différence finie D_{ij} non nul soit celui pris en (A, U) on a $U = A + \Delta x$.
2. Supposons que $A + \Delta x \geq \min(B, D)$; sans perdre de généralité on peut supposer que $B \leq D$ donc le schéma nous donne à résoudre l'équation quadratique :

$$(U - A)^2 + (U - B)^2 = \Delta x^2$$

Le discriminant de cette équation est positif si, et seulement si, $\Delta x \geq \frac{B-A}{\sqrt{2}}$. Cette condition est satisfaite puisqu'on a supposé que $A + \Delta x \geq B$.
L'étude de l'équation quadratique assure aussi que : la solution U est telle que $U \geq B$ et $U \leq A + \Delta x$
Ainsi, dans les 2 cas ci-dessus, a-t-on bien montré que $A \leq U \leq A + \Delta x$.

– **2e cas**

1. On suppose que B est dans Known, A est le plus petit de la Narrow Band et ni C ni D ne sont dans Known.
Comme B est dans Known, lors d'une itération précédente, il a été, tout comme A, converti de la Narrow Band en Known. $B \leq A, C, D$.
De plus, U voisin de B a été recalculé lors de cette précédente itération mais, comme c'est A qui est le minimum de la Narrow Band, cela signifie que $A \leq B + \Delta x$ car $A \leq U_{recalcul\ par\ B} \leq B + \Delta x$, ce d'après la preuve du 1er cas applicable à B et $U_{recalcul\ par\ B}$.
On retombe alors sur le point 2 du cas précédent donc $A \leq U_{recalcul\ par\ A}$.
2. On suppose que C est dans Known, A est le plus petit de la Narrow Band et ni B ni D ne sont dans Known.
Dans cette configuration, l'opérateur de différence finie suivant la direction de (A, C) va capter le terme en C qui provient d'une conversion antérieure qui a recalculé U. Mais, comme U n'est pas le minimum de la Narrow Band actuelle, on a : $A \leq U_{recalcul\ par\ C}$
De plus, quand U est recalculé, c'est avec C (car $A \geq C$) et $\min(B, D)$ avec $B \geq A$ et $D \geq A$ donc la résolution de l'équation quadratique donne un U tel que $U \geq C$ et $U \geq \min(B, D)$. En somme $A \leq U$.

– **3e cas**

1. On suppose que B et C sont dans Known, A est le minimum de la Narrow Band et D n'est pas dans Known.
Nécessairement, par nature de l'opérateur de différence finie, ce sont B et C qui vont intervenir dans le calcul de U qui a déja été calculé par :

– B : $B \leq U_{recalcul\ par\ B} \leq B + \Delta x$ (Calcul à un point : B).

– C : $C \leq U_{recalcul\ par\ C} \leq C + \Delta x$ (Calcul à deux point : B et C).

Mais malgré cela, A est le minimum de la Narrow Band, donc $A \leq U_{avant\ recalcul\ courant}$, donc il va y avoir un recalcul inutile puisqu'il donne la même valeur de U qui est de plus, supérieure à A.

2. B et D sont dans Known, A est le minimum de la Narrow Band et C n'est pas dans Known.
   Le minimum de B et D est pris et on retombe sur le 1. du 2$^{\text{e}}$ cas.

– **4$^{\text{e}}$ cas**
B, C et D sont dans Known : $\min(B, D)$ est pris par l'opérateur de différence finie, donc on retombe sur le point 1. du 3$^{\text{e}}$ cas.

□

En résumé, nous venons de voir que la méthode *Fast Marching* réalise un calcul qui fait progresser le front des points dont la valeur est solution du problème (4.35), en s'éloignant de l'interface. Un point qui se voit affecté de la distance signée ne sera donc jamais recalculé. Il existe cependant une seconde source qui justifie le qualificatif de cette approche : l'*implémentation*.

En effet, la clé d'une *exécution véloce* de l'algorithme *Fast Marching* réside dans la *rapidité à déterminer le minimum de la Narrow Band*, puisque c'est l'opération qui requiert le plus de temps.

On est ici en présence d'un problème où il faut gérer un ensemble de données dont le nombre d'éléments est modifié en permanence de par la suppression du minimum et de l'ajout de ses voisins calculés. Qui plus est, la valeur de ϕ introduit la notion de "priorité" dans l'ensemble des points de la NB. De manière naturelle, la structure de tas se révèle alors être la meilleure structure de données pour gérer cet ensemble. En effet, pour augmenter la rapidité de l'algorithme, il faut que la recherche du minimum prenne le moins de temps possible. Or, si la NB est triée de manière à ce que le minimum de ϕ soit le premier élément accessible, sa détermination est immédiate. Détaillons la structure de tas et les avantages qu'elle confère.
Un tas est un arbre quasi parfait muni d'une valuation (val) sur l'ensemble de ses sommets dans un ensemble complet ordonné. La relation d'ordre est ici la relation canonique $(\mathbb{R}, <)$. De plus, si on note $f_g(s)$ et $f_d(s)$ respectivement les fils gauche et droit du sommet s, on a, si $f_g(s)$ et $f_d(s)$ existent :

$$(\mathcal{O}) \begin{cases} val(f_g(s)) > val(s) \\ val(f_d(s)) > val(s) \end{cases} \tag{4.37}$$

Cette propriété justifie alors l'appellation d'arbre binaire quasi parfait valué, ordonné verticalement (*cf.* Figure 4.19).

Pour un nombre de sommets donné, un arbre binaire quasi parfait est unique. On peut donc lui associer une représentation séquentielle matérialisée par un tableau où un nœud, stocké à la i^{e} position, a ses fils gauche et droit stockés respectivement aux positions $2i$ et $2i + 1$. Le père d'un nœud stocké en i se situe donc à l'emplacement $E[\frac{i}{2}]$. De plus, la racine de l'arbre se situe à la position $i = 1$ (*cf.* Figure 4.20).

Lors de la phase itérative de l'algorithme *Fast Marching*, on doit disposer de deux structures de données : l'une pour stocker les valeurs de la distance calculée au point $(i; j)$ et l'autre pour stocker la Narrow Band. On appelle Distance la première structure et NarrowBand la seconde.

La structure de données Distance peut par exemple être une matrice $(n \times m)$ [pour les $n \times m$ points de discrétisation du domaine de calcul] d'un type structuré à deux champs :

– un réel "dist" pour stocker la valeur de la distance calculée ;

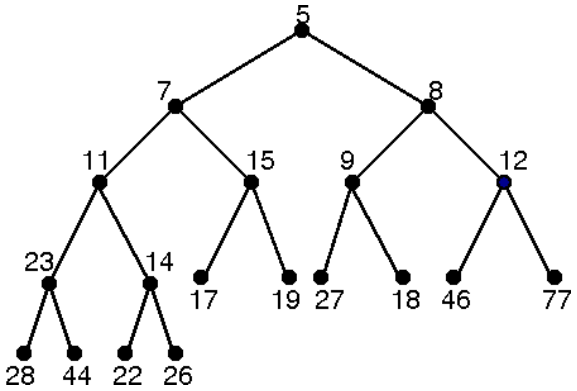


FIG. 4.19 – Représentation arborescente d'un tas

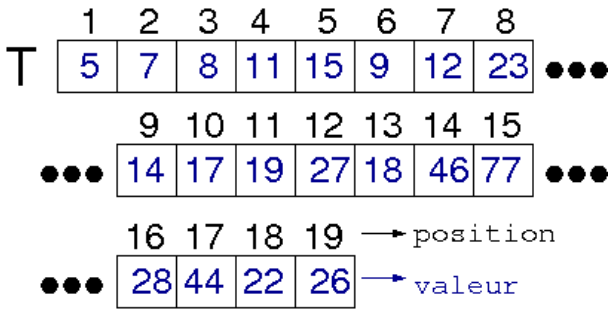


FIG. 4.20 – Représentation séquentielle d'un tas

– un type simple (entier ou pointeur) pour stocker la position dans la structure Narrow-Band du point (i ;j) lorsque celui-ci est dans la Narrow Band. (Nous allons voir dans la suite l'utilité de ce second champ).

Pour réaliser le stockage de la Narrow Band et son tri en fonction des valeurs de ϕ, une cellule du tas NarrowBand doit être constituée des données suivantes :

– les entiers $(i; j)$ qui localisent le point du maillage ;
– la valeur $\phi(i; j)$ sur laquelle opère la relation d'ordre.

Ensuite, deux opérations fondamentales sont utilisées pour gérer le tas : une procédure "Ajouter" qui ajoute une cellule dans le tas et une procédure "SupprimeMin" qui supprime le minimum du tas (c'est-à-dire la racine du tas). Ces deux procédures sont construites de telle manière, qu'après leur action sur le tas, ce dernier vérifie la propriété d'ordre $(\mathcal{O})$.

Lors de l'ajout d'un élément, la taille du tas est incrémentée de un et la cellule est ajoutée en dernière position. Dès lors, tant que son père a un ϕ supérieur au sien, on échange cette cellule avec son père. Il en résulte une remontée de la nouvelle cellule dans l'arbre jusqu'à ce qu'elle soit à la place correcte au sens de $(\mathcal{O})$. Cette opération est illustrée sur la Figure 4.21.

Lorsqu'on supprime la racine, le tas doit être retrié. Pour cela, la dernière feuille est placée à la racine du tas. Puis, tant que l'un de ses deux fils a une valeur de ϕ inférieure à la sienne, on échange cette cellule avec son fils de plus petite valeur. Ainsi, cette cellule opère une descente dans l'arbre jusqu'à ce qu'elle soit à la place exigée pour vérifier $(\mathcal{O})$.

Enfin, on utilise une troisième opération pour conserver la propriété d'ordre du tas lorsque c'est une cellule de la Narrow Band qui est calculée lors de la phase itérative. Il s'agit ici

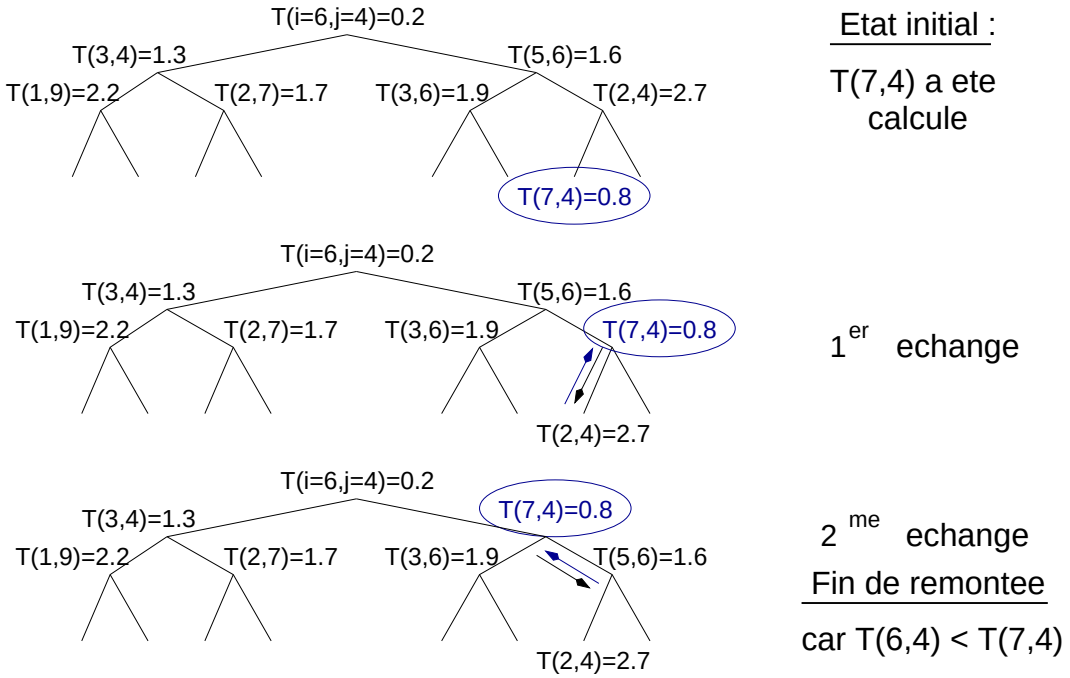


FIG. 4.21 – Remontée d'une cellule

d'un recalcul donc la nouvelle valeur de ϕ obtenue pour la cellule considérée est susceptible d'enfreindre la propriété d'ordre du tas. La procédure "TriUp" se charge alors de déplacer la cellule mise à jour vers la place adéquate, dictée par la relation d'ordre $(\mathcal{O})$, dans le tas. Le principe d'échange des cellules est le même que celui utilisé pour "Ajout" et "SupprimeMin". Pour trouver instantanément la place, dans le tas NarrowBand, des voisins connus réactualisés lors de la phase itérative, on dote la structure de données Distance d'un pointeur sur la position k de $[(i;j)\,;\,\phi(i;j)]$ dans NarrowBand. Ainsi, la procédure "TriUp" peut commencer directement son travail de tri au niveau de la cellule dont le $\phi(i;j)$ a été modifié. Sans ces pointeurs réciproques des pointeurs (i ;j) de NarrowBand vers Distance, le temps de recherche des voisins de la Narrow Band serait, dans le pire des cas, en $\mathcal{O}$(M) où M est le nombre d'éléments du tas.

La structure de tas confère à ces algorithmes une efficacité qui est l'une des meilleures dans les cas dits "au pire". Pour une étude détaillée de la structure de tas et de la complexité des algorithmes ci-dessus, on pourra se reporter à [51] et [142].

Si on suppose que le maillage contient N points et que ces N points vont être traités par l'algorithme *Fast Marching* alors, la complexité au pire est en $\mathcal{O}(N \log N)$. Ces résultats sont détaillés de manière approfondie dans [145].

Pour conclure sur l'approche *Fast Marching*, nous dirons que la méthode standard décrite ci-dessus est d'ordre un. On pourra consulter [145] et [115] et leurs références pour plus de détails sur les techniques permettant d'augmenter l'ordre de précison.
Nous pouvons aussi faire le lien avec la méthode de Russo et Smereka présentée juste avant. En effet, si l'on adopte une approche "truly upwind" pour la méthode *Fast Marching* alors elle est équivalente, en terme d'ordre, à l'équation de redistanciation, tout en étant nettement plus rapide.

Ainsi, au cours de ce chapitre, nous avons présenté les deux outils couramment utilisés par la communauté Level Set pour redistancier une fonction définissant implicitement une interface. Nous avons vu en particulier que la discrétisation "truly upwind" de Russo et Smereka permet de résoudre avec précision les équations concernées. Il faut noter que les pertes de masse souvent décriées dans la littérature sont en fait majoritairement dues à l'utilisation directe des méthodes (W)ENO sans prendre en compte la correction introduite par ces auteurs. Par ailleurs, le qualificatif de la méthode *Fast Marching* a été justifié lors de sa description. Elle apparaît ainsi comme une approche attractive grâce aux gains de temps substantiels qu'elle apporte. Au cours de nos travaux, nous avons utilisé tour à tour ces deux approches pour redistancier, au gré des diverses applications abordées.

Nous arrivons maintenant au terme de cette première partie. Nous avons tout d'abord présenté la problématique générale que constitue le suivi d'interface : les applications sont nombreuses et revêtent des problèmes scientifiques ouverts ainsi que des enjeux sociétaux de première importance. Pour simuler numériquement ces interfaces mobiles, il existe plusieurs types de méthodes dont le spectre a été balayé rapidement (sans prétendre à une quelconque exhaustivité).

Nous nous sommes ensuite concentrés plus particulièrement sur l'approche qui sous-tend ce manuscrit, à savoir la méthode Level Set. Après avoir décrit son principe et la terminologie des techniques qui lui sont associées, nous avons détaillé sa mise en pratique *via* la description des méthodes numériques de résolution utilisées par la communauté. Les outils mis en oeuvre, pour le suivi d'interface que nous avons réalisé dans cette thèse, étant posés et sachant que leur degré de précision vérifie les exigences nécessaires pour nos applications, nous allons dans la prochaine partie, nous focaliser sur les causes qui meuvent l'interface. Il s'agit, en l'occurrence, d'écoulements à deux fluides immiscibles, pilotés par la tension de surface. Nous donnerons donc des modèles pour décrire ces écoulements qui génèrent des nouvelles questions en analyse numérique. Ensuite, nous proposerons des voies numériques qui nous mènerons aux simulations en microfluidique de la troisième et dernière partie.

Deuxième Partie

Analyse et Résolution numérique d'écoulements bifluides pilotés par la tension de surface

Chapitre 5

Modèle bifluide avec tension de surface

Grâce à la première partie, nous disposons d'outils efficaces pour suivre une interface mobile, Γ. Cependant, nous sommes restés évasifs, jusqu'à présent, sur le champ de vitesse $\mathbf{v}$ responsable du déplacement de Γ. Aussi, cette deuxième partie est-elle dédiée à la présentation d'un modèle fluide *ad hoc* pour les simulations de la partie suivante.

Nous détaillerons les équations qui permettent de modéliser des écoulements constitués de deux fluides immiscibles conduisant à la présence d'interfaces. Les phénomènes de tension de surface seront pris en compte et intégrés dans le modèle en exploitant, avec profit, une formulation *Level Set*. De plus, il faudra aussi décrire des conditions aux limites non homogènes sur les parois. Munis d'un modèle complet, nous présenterons alors sa discrétisation et les solveurs utilisés pour obtenir les simulations. Il s'agira de méthodes couramment répandues dans la littérature : cela permettra de présenter de manière relativement familière l'approche découplée induite par la méthode *Level Set*. Ainsi arriverons-nous au terme du présent chapitre.

Dans le chapitre 6 qui suit, nous aborderons la contribution principale de nos travaux en analyse numérique : la dérivation d'une nouvelle condition de stabilité pour la classe des schémas exposés précédemment. Elle s'applique en fait à toutes les approches qui réalisent un découplage entre la résolution de l'écoulement et le transport de l'interface. Cette condition s'inscrit dans le prolongement du travail de référence [17] de Brackbill, Kothe et Zemach en 1992, où est introduite l'approche CSF pour traiter le terme de tension de surface. Par ailleurs, elle apporte un éclairage nouveau sur les phénomènes de courants parasites observés au voisinage de l'interface. Pour clore cette partie et faire le lien avec la dernière, consacrée aux applications de ces résultats à des écoulements en microfluidique, nous présenterons ensuite une méthode de décomposition (ou *splitting*) permettant d'exploiter leurs caractéristiques et ainsi de diminuer les temps de simulation.

5.1 Présentation du modèle

Il est désormais temps de décrire plus avant, le cadre sous-jacent des frontières se mouvant ... C'est dans la dynamique des fluides que nous trouverons les équations qui vont gouverner les phénomènes physiques du milieu où évoluent nos interfaces.

En mécanique des fluides, on distingue différents types d'*écoulements à frontières libres* :

- vagues et ondes : "externes" au sens où l'air est au-dessus d'un liquide beaucoup plus dense (dont la Figure 1.1 est un exemple typique) ou "internes" au sens où les interfaces séparent des milieux différents, au sein même du domaine fluide ;

- jets : la même distinction que ci-dessus peut s'appliquer, relativement à leur environnement ;
- films minces : ils sont à considérer dans les processus d'enduction ou de séchage sur différents substrats ;
- gouttes et bulles : elles sont très utilisées en chimie ; ce sont les interfaces qui nous concernent le plus, dans le cadre de cette thèse.

Pour formuler mathématiquement les équations gouvernant les écoulements considérés, nous allons tout d'abord préciser les hypothèses physiques retenues. On suppose, comme évoqué précédemment que les écoulements mettent en jeu deux fluides immiscibles visqueux et newtoniens (*i.e.* le tenseur des contraintes dépend linéairement des taux de déformation). De plus, les deux fluides seront considérés incompressibles et isothermes. Ainsi, la densité (ou masse volumique) ne dépend ni de la pression, ni de la température. Qui plus est, comme la viscosité est aussi indépendante de la température, l'équation de l'énergie se retrouve découplée des autres lois de conservation (de la masse et de la quantité de mouvement) : on ne considérera donc pas cette équation dans la suite. Par ailleurs, les fluides sont supposés homogènes, si bien que viscosité et densité sont constantes dans chaque espèce.
Les applications physiques que l'on va traiter suggèrent d'adopter un modèle d'interface ponctuelle, par suite, les caractéristiques des deux fluides exhibent un saut à l'interface. Nous prenons en compte la tension de surface entre les deux fluides qui jouera un rôle prépondérant dans les dynamiques étudiées. Par contre, on négligera les transferts de masse à l'interface, ce qui lui confère un caractère imperméable. Dans un premier temps, nous supposerons que la présence de surfactant n'induit pas de variation de la tension de surface ; en conséquence, le coefficient de tension de surface sera considéré comme étant constant.

Ensuite, nous allons supposer que l'on étudie l'écoulement dans un domaine borné $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ dans $\mathbb{R}^2$ (ou $\mathbb{R}^3$). Par souci de simplicité, la présentation est faite en 2D (*cf.* Figure 5.1) ; l'extension en 3D suit la même philosophie. En notant, $\partial\Omega_i$, le bord du domaine Ω_i contenant le fluide i, l'interface Γ est caractérisée par : $\Gamma = \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2$.

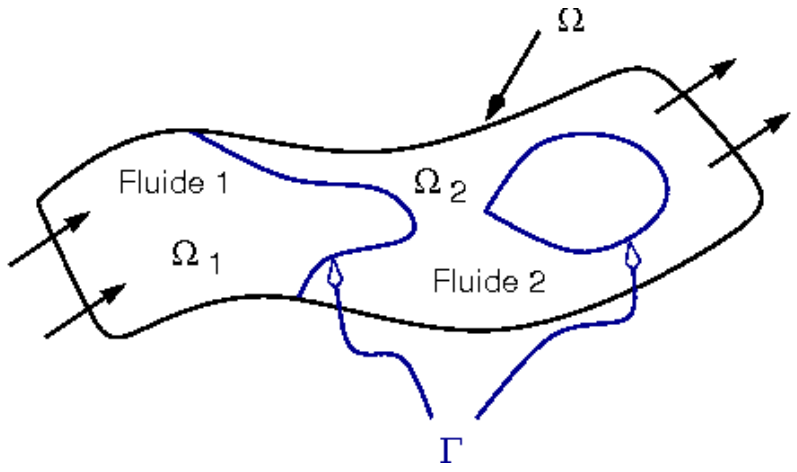


FIG. 5.1 – Le domaine $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ où évoluent les deux fluides, séparés par l'interface Γ.

Des diverses hypothèses physiques énoncées à l'instant, il résulte que chaque fluide $i = \{1, 2\}$ est gouverné par les équations de Navier-Stokes, associées aux écoulements incompressibles :

$$\rho_i \left(\frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial t} + \mathbf{u}_i . \nabla \mathbf{u}_i \right) - \nabla . (2\eta_i D\mathbf{u}_i) + \nabla p_i = \mathbf{F} \quad \forall (t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega_i, \tag{5.1}$$

$$\nabla.\mathbf{u}_i = 0 \quad \forall(t,\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega_i, \tag{5.2}$$

où $\mathbf{u}_i$ est le champ de vitesse, p_i la pression, ρ_i la densité, η_i la viscosité relativement au fluide i, $\mathbf{F}$ une force volumique (que l'on détaillera dans la suite) et $D\mathbf{u} = (\nabla\mathbf{u} + \nabla^T\mathbf{u})/2$. A cela, il faut ajouter les conditions aux limites sur l'interface Γ (on note $[a] = a_2 - a_1$, le saut de la quantité a au travers de Γ) :

$$[\mathbf{u}] = 0 \tag{5.3}$$

$$[-pI + 2\eta D\mathbf{u}]\,.\mathbf{n} = \sigma\kappa\mathbf{n} \tag{5.4}$$

où les scalaires σ et κ représentent respectivement le coefficient de tension de surface et la courbure de l'interface. Le vecteur $\mathbf{n}$ donne la normale à l'interface. Ces conditions traduisent la continuité de la vitesse à l'interface (5.3) ainsi que l'équilibre entre le saut des contraintes normales et la tension de surface (5.4).

Il est ensuite possible de dériver une formulation *Level Set* qui intègre les conditions aux limites sur Γ et donne une équation de Navier-Stokes globale sur le domaine Ω. Une telle dérivation est présentée par Chang, Hou, Merriman et Osher dans [23] ; elle a aussi été utilisée dans l'article fondateur de Sussman, Smereka et Osher [169]. C'est cette approche que nous adoptons dans cette thèse, à savoir :

$$\rho\left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right) - \nabla.(2\eta D\mathbf{u}) + \nabla p = \mathbf{F} + \sigma\kappa\delta(\phi)\mathbf{n} \quad \forall(t,\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \tag{5.5}$$

$$\nabla.\mathbf{u} = 0 \quad \forall(t,\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \tag{5.6}$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\phi = 0 \quad \forall(t,\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \tag{5.7}$$

où $\mathbf{u}$ est le champ de vitesse défini sur Ω, tout comme la pression p, la densité ρ et la viscosité η. La fonction *Level Set* est, par exemple, telle que :

$$\phi \begin{cases} > 0 & \text{dans le fluide 2} \\ = 0 & \text{sur l'interface} \\ < 0 & \text{dans le fluide 1} \end{cases} \tag{5.8}$$

Il s'agit d'un modèle monofluide à densité et viscosité variables, données respectivement par :

$$\rho(\phi) = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)H(\phi) \tag{5.9}$$

$$\eta(\phi) = \eta_1 + (\eta_2 - \eta_1)H(\phi) \tag{5.10}$$

La tension de surface apparaît comme une force volumique singulière, localisée sur l'interface, grâce à la fonction de Dirac déjà présentée avec les outils *Level Set*, tout comme la normale à l'interface. Il convient aussi de noter qu'un tel traitement, du terme de tension de surface, est très proche des travaux de Chandrasekhar [22], Peskin [119], Brackbill *et al.* [17] ainsi que d'Unverdi et Tryggvason [183]. Cette approche a été maintes fois utilisée par la suite, dans différentes méthodes de suivi d'interface (par exemple dans [129, 149] pour les méthodes VOF et [167, 157] en *Level Set*, pour ne citer que quelques travaux).

Nous décrirons plus avant le contexte physique dans la troisième partie mais notons d'ores et déjà que, pour nos applications, les forces volumiques – autres que la tension de surface – contenues dans $\mathbf{F}$ (*e.g.* l'accélération de la pesanteur) sont négligeables devant les effets capillaires. Si bien que dans la suite, nous ne mentionnerons plus ce terme dans les équations de la quantité de mouvement. De plus, les termes d'inertie n'auront souvent qu'une faible influence sur l'écoulement. En conséquence, les deux modèles qui émailleront la suite de ce manuscrit

seront :

le modèle de Navier-Stokes instationnaire :

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right)-\nabla.(2\eta D\mathbf{u})+\nabla p=\sigma\kappa\delta(\phi)\mathbf{n}\quad\forall(t,\mathbf{x})\in\mathbb{R}^+\times\Omega, \tag{5.11}$$

le modèle de Stokes instationnaire :

$$\rho\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}-\nabla.(2\eta D\mathbf{u})+\nabla p=\sigma\kappa\delta(\phi)\mathbf{n}\quad\forall(t,\mathbf{x})\in\mathbb{R}^+\times\Omega. \tag{5.12}$$

Nous utiliserons tour à tour ces équations, ainsi que leurs versions stationnaires, au gré des applications abordées.

Remarque 5.1 : Prise en compte d'obstacles

Nous aurons parfois besoin de simuler des obstacles solides au sein de nos écoulements. Pour cela nous utiliserons une méthode de pénalisation telle que présentée dans les travaux d'Angot *et al.* [9]. Cette approche sera détaillée au chapitre 9.

5.2 Conditions aux limites

Sur la Figure 5.1, nous avions laissé entendre qu'une partie du bord $\partial\Omega$ du domaine Ω était le siège d'injection et d'expulsion des fluides qui transitent en son sein. Il convient donc de préciser les conditions aux limites sur $\partial\Omega$.

Pour cela, nous noterons $\partial\Omega_{inj}$ les zones du bord en lesquelles du fluide est injecté (il pourra s'agir d'un mélange des deux espèces considérées) et $\partial\Omega_{out}$, les zones par lesquelles s'échappe l'écoulement. De plus, on appelle $\partial\Omega_{wall}$ les parties du bord constituées de parois solides. On dispose alors d'une partition globale de la frontière de notre domaine (*cf.* Figure 5.2) :

$$\partial\Omega=\partial\Omega_{inj}\cup\partial\Omega_{out}\cup\partial\Omega_{wall} \tag{5.13}$$

La normale sortante à $\partial\Omega$ est notée $\mathbf{n}_\Omega$ et la tangente associée, τ_Ω. Nous opterons pour les conditions aux limites suivantes :

- sur $\partial\Omega_{inj}$: on suppose que $\mathbf{u}$ est connu ; par exemple, pour une injection monofluide, on pourra imposer un profil de Poiseuille simple ;
- sur $\partial\Omega_{out}$: on simulera une sortie libre du fluide *via* :

$$\left\{\begin{array}{rcl}\frac{\partial(\mathbf{u}.\mathbf{n}_\Omega)}{\partial\mathbf{n}_\Omega} & = & 0\\ \mathbf{u}.\tau_\Omega & = & 0\end{array}\right. \tag{5.14}$$

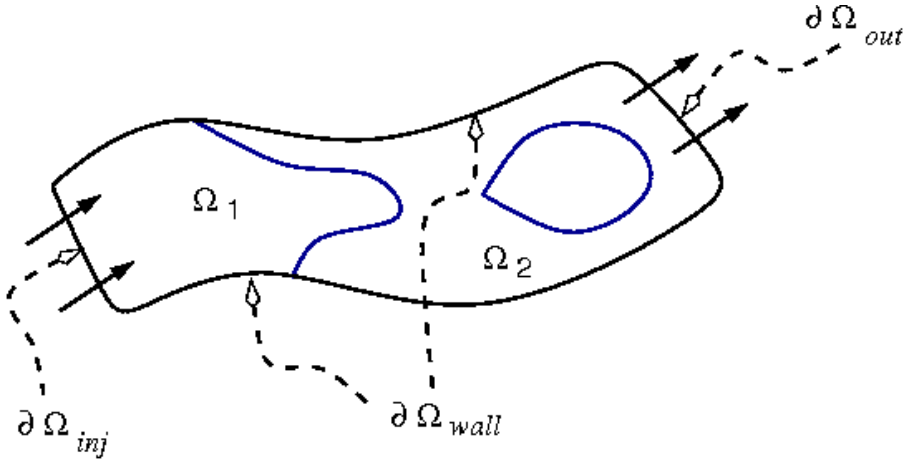


FIG. 5.2 – Partitionnement du bord de Ω pour affecter différentes conditions aux limites.

– sur $\partial\Omega_{wall}$: nous autoriserons le fluide à glisser sur la paroi à l'aide d'une condition de type mixte Dirichlet-Robin, *i.e.*

$$\begin{cases} \mathbf{u}.\tau_\Omega = \alpha u_s(\eta) + \beta L_s(\eta)\frac{\partial(\mathbf{u}.\tau_\Omega)}{\partial \mathbf{n}_\Omega} \\ \mathbf{u}.\mathbf{n}_\Omega = 0 \end{cases} \tag{5.15}$$

où les scalaires α et β sont affectés à 0 ou 1 suivant que l'on connaît la vitesse de glissement u_s ou la longueur de glissement L_s, qui dépendent *a priori* de la viscosité.

Justifions cette dernière condition. Il faut avoir à l'esprit que pour des écoulements bi-fluides, il est parfois nécessaire de traiter le cas où une ligne de contact se déplace le long de la paroi solide. C'est là qu'apparaît alors la nécessité d'imposer une condition qui autorise le glissement à la paroi ; en effet, on lève ainsi la singularité, attachée à la ligne de contact et induite par une condition de non glissement. Il est effectivement bien connu que, si la vitesse s'annule à la paroi, alors la force nécessaire pour déplacer la ligne de contact est infinie [39]. Dans les applications pratiques, u_s et/ou L_s sont données par les expériences physiques. En plus de (5.15), l'angle de contact entre la ligne de contact et le mur doit être imposé, de manière à avoir un problème bien posé ; enfin, cet angle dépend de la vitesse de la ligne de contact [39]. Dans un contexte *Level Set*, l'angle peut être calculé grâce à la fonction ϕ. Le point clé, pour que le problème soit bien posé, est d'imposer la condition aux limites sur la vitesse dans Navier-Stokes et non pas sur ϕ dans l'équation de transport. La relation entre l'angle de contact et la vitesse de glissement est donnée par les expériences physiques et fait partie des paramètres de la simulation numérique.

Nous n'avons pas, dans cette thèse, mené une étude plus détaillée des modèles et des méthodes numériques pour gérer les lignes de contact. On pourra se référer, par exemple, aux récents travaux de Spelt [157] ou de Liu *et al.* [96] dans un contexte Level Set ainsi qu'à ceux de Qian *et al.* [124] dont Gerbeau et Lelièvre [53] en proposent une formulation ALE.

Attardons-nous maintenant, quelques instants, sur la condition de Robin à la paroi ($\alpha = 0$ et $\beta = 1$ dans (5.15)) :

$$\mathbf{u}.\tau_\Omega = L_s(\eta)\frac{\partial(\mathbf{u}.\tau_\Omega)}{\partial \mathbf{n}_\Omega} \tag{5.16}$$

et son adéquation avec le profil imposé sur $\partial\Omega_{inj}$.

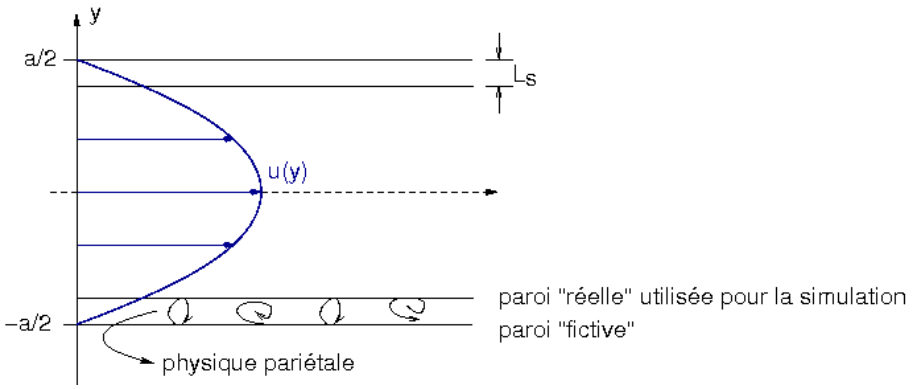


FIG. 5.3 – Ecoulement de Poiseuille

Tout d'abord, rappellons qu'un écoulement de Poiseuille entre deux plans parallèles (voir Figure 5.3) présente un profil de vitesse de la forme :

$$u(y) = V_{max}\left(1 - \frac{4y^2}{a^2}\right) \quad \forall y \in \left[-\frac{a}{2}; \frac{a}{2}\right] \tag{5.17}$$

Par ailleurs, le modèle que nous utilisons fait intervenir une condition de Robin qui traduit une vitesse de glissement à la paroi. Dans une configuration de type Poiseuille, on peut interpréter ce modèle comme un écoulement de Poiseuille tronqué à une distance L_s de la paroi (*cf.* Figure 5.3). En d'autres termes, on suppose que la physique complexe qui a lieu dans une couche pariétale d'épaisseur L_s peut être modélisée par une vitesse de glissement à une distance L_s de la paroi. On appelle alors logiquement L_s la longueur de glissement ("*slip length*"). Si on combine le profil de Poiseuille et la condition de Robin, alors on dispose d'une relation entre la longueur de glissement et le diamètre a du canal "fictif" dans lequel ce profil s'annule au bord. Lorsque l'on réalise les simulations numériques, il est fréquent de connaître L_s ou sa proportion f par rapport à a : $L_s = f\,\frac{a}{2}$. Un calcul élémentaire, utilisant la condition de Robin (5.16) sur une paroi horizontale :

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \alpha(\eta)u(y) \quad \text{avec } \alpha(\eta) = \frac{1}{L_s} \tag{5.18}$$

et le profil de vitesse (5.17), donne la relation suivante entre y_0 et a, qui induit un profil de Poiseuille vérifiant la condition de Robin en y_0 :

$$a = 2\,y_0\left(\sqrt{f^2+1} + f\right) \tag{5.19}$$

avec $a/2 > y_0 > 0$ et $f \in]0,1[$. Typiquement, $f \sim 1/100$ donc, par exemple, pour un canal de diamètre unitaire : $y_0 \sim 1/2$ et on a $a \sim 1.01$. Ainsi, lors de nos simulations numériques, nous utiliserons comme condition d'entrée le profil de vitesse (5.17) avec le a vérifiant (5.18) de manière à avoir un profil consistant avec la condition de Robin. Sur les Figures 5.5, on montre l'amélioration induite par une vitesse compatible. Il s'agit de la composante $u(x,y)$ d'un champ de vitesse $\mathbf{u} = (u,v)$ calculé sur une croix (*cf.* Figure 5.4) ; la vue est prise de profil, dans la direction de l'axe de sortie. Au travers de cet exemple simple, nous illustrons le fait qu'il faut naturellement tenir compte de la consistance des raccords entre les différents types de conditions aux limites imposées sur $\partial\Omega$. C'est un point dont nous avons constamment tenu compte dans ces travaux. Il en résulte une meilleure convergence des solveurs et des résultats d'une précision accrue.

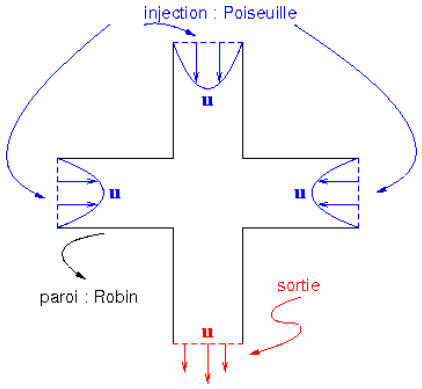


FIG. 5.4 – géométrie et conditions aux limites pour une croix

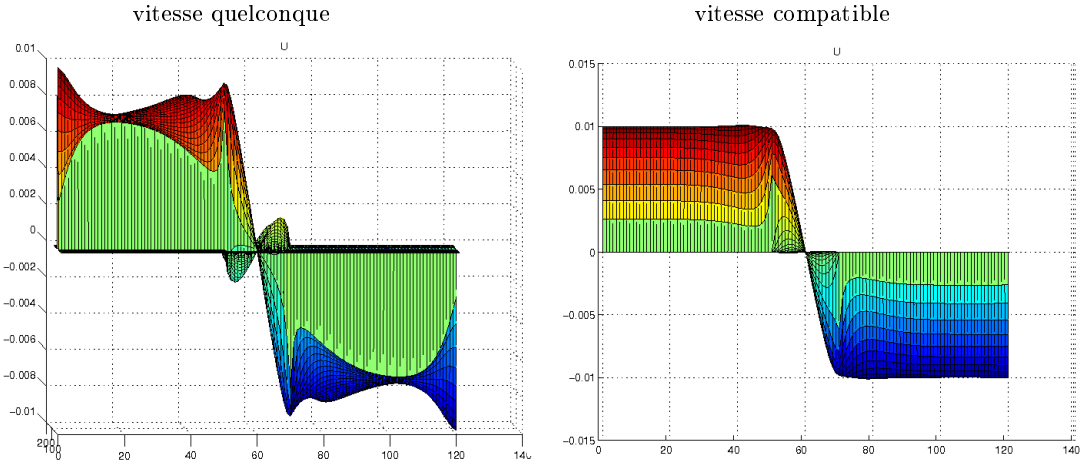


FIG. 5.5 – Effet de la compatibilité des vitesses d'injection, dans la configuration présentée Figure 5.4.

5.3 Discrétisations et Solveurs

Dans cette section, nous allons décrire la procédure générale que nous avons adoptée pour résoudre numériquement la formulation *Level Set* (5.11)-(5.6)-(5.7). Ensuite, nous présenterons les discrétisations en temps et en espace ainsi que les solveurs utilisés pour simuler l'évolution de nos interfaces bifluides.

5.3.1 Procédure générale

Nous rappellons que nous nous plaçons dans une géométrie bidimensionnelle. La même approche est valable en 3D. Nous suivons toujours le travail de Sussman *et al.* [169]. L'algorithme de résolution est le suivant, dans la droite ligne des méthodes découplées (vis-à-vis de l'écoulement et du déplacement de l'interface) :

1. Initialisation de la fonction *Level Set* ϕ qui capture l'interface et actualisation des caractéristiques physiques η et ρ grâce à (5.9) et (5.10).
2. Calcul de la normale $\mathbf{n}$ et de la courbure κ grâce à (2.7) et (2.8).
3. Résolution de l'équation de Navier-Stokes (5.11)-(5.6) pour obtenir $(\mathbf{u}, p)$.
4. Réactualisation de ϕ en résolvant l'équation de transport (5.7) associée à $\mathbf{u}$.
5. Si nécessaire, appliquer une procédure de redistanciation sur ϕ.
6. Itérer les étapes (2) à (5) pour chaque pas de temps discret.

Dans notre code, nous utilisons les outils évoqués dans la première partie, à savoir :
- le schéma WENO5 ;
- la redistanciation *via* l'équation de réinitialisation ou la méthode Fast Marching ;
- la méthode de "translation" de ϕ, si nécessaire.

Cette dernière méthode a été formalisée par Smolianski [155] (même si elle était probablement employée dans de nombreux codes sans être mentionnée). Nous reprenons ici son propos.

Supposons que l'on dispose d'un ϕ qui est une distance signée. On peut corriger l'aire du domaine $\Omega_2 = \{x \in \Omega / \phi > 0\}$, tout en conservant la forme de l'interface, en utilisant une nouvelle ligne de niveau de ϕ située dans un voisinage de l'interface (voir Figure 5.6). Pour cela, il suffit de translater la fonction *Level Set* dans la direction verticale par ajout d'une constante C_ϕ, où $|C_\phi|$ est la distance entre l'ancienne isovaleur et la nouvelle (puisque ϕ est une distance signée).
Pour déterminer l'expression de C_ϕ, on note ϕ^{new} la nouvelle fonction vérifiant la conservation de la masse et $\Omega_2^{new} = \{x \in \Omega / \phi^{new} > 0\}$. Smolianski utilise une relation relative à la variation d'une intégrale de volume :

$$\begin{aligned} S_{exact} - S(\Omega_2) &= \int_{\Omega_2^{new}} dx - \int_{\Omega_2} dx = \int_\Gamma (C_\phi.\mathbf{n}).\mathbf{n} d\Gamma + \mathcal{O}({C_\phi}^2) \\ &= C_\phi \int_\Gamma d\Gamma + \mathcal{O}({C_\phi}^2) \end{aligned} \tag{5.20}$$

où S_{exact} est l'aire exacte de la région Ω_2 à l'initialisation du calcul (elle est donc supposée connue) et $S(\Omega_2)$ est l'aire Ω_2 à l'instant de calcul courant. On en déduit que :

$$C_\phi = \frac{S_{exact} - S(\Omega_2)}{L(\Gamma)} \tag{5.21}$$

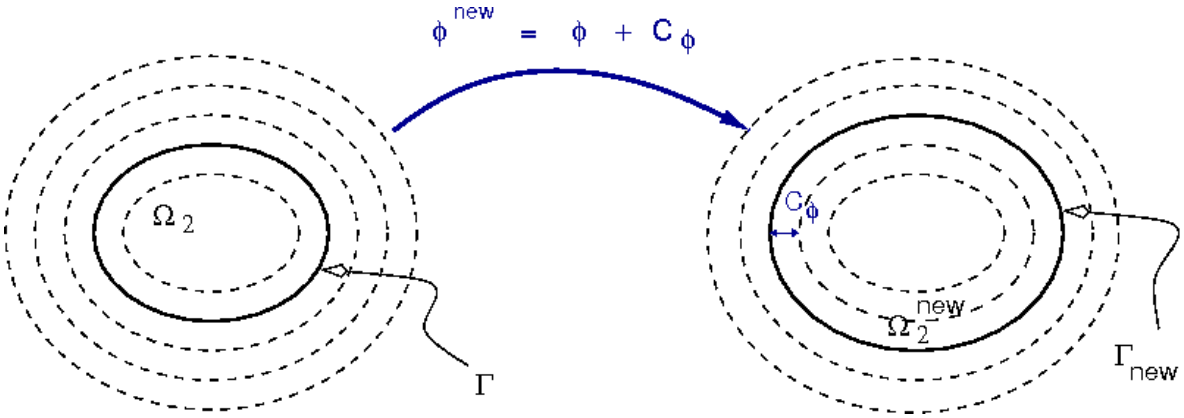


FIG. 5.6 – Méthode de translation pour corriger la variation de masse, selon [155]. Les isovaleurs en gras sont : à gauche, l'ancienne interface et à droite, la nouvelle interface dont l'aire associée vérifie la conservation de la masse.

où $L(\Gamma)$ est la longueur de l'interface Γ. Cette translation de ϕ, en vue de corriger le volume, est légitime dés lors que ϕ est une distance signée (au moins au voisinage de l'interface) et que C_ϕ est suffisament faible. Cette dernière condition vient naturellement du fait qu'on ne peut pas déplacer l'interface d'une quantité comparable à l'erreur de l'interpolation de l'interface contenue dans (5.21), à l'ordre deux en C_ϕ. On peut noter que d'un pas de temps à l'autre, en pratique, cette correction est très faible ; en revanche elle permet d'éviter d'accumuler des erreurs de volume lorsqu'un grand nombre d'itérations en temps est réalisé.

On peut déterminer la constante C_ϕ par d'autres voies que celle empruntée par [155]. En particulier, on peut mettre en oeuvre des techniques de point fixe.

5.3.2 Discrétisation en temps

Une discrétisation d'ordre un (ou méthode d'Euler) est utilisée pour faire évoluer l'équation en temps. On note n et $n+1$ les indices relatifs aux temps courant et ultérieur, séparés par le pas de discrétisation Δt. En se basant sur l'algorithme présenté à la section précédente, on dispose de la vitesse $\mathbf{u}^n$ et de la fonction ϕ^n au temps courant qui nous permettent de résoudre l'équation de Navier-Stokes pour obtenir $(\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1})$; on peut alors calculer ϕ^{n+1} grâce à l'équation de transport. En d'autres termes :

$$\rho^n \left(\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^n . \nabla \mathbf{u}^n \right) - \nabla . (2\eta^n D\mathbf{u}^{n+1}) + \nabla p^{n+1} = \sigma \kappa^n \delta(\phi^n)\mathbf{n} \tag{5.22}$$

$$\nabla . \mathbf{u}^{n+1} = 0 \tag{5.23}$$

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^{n+1} . \nabla \phi^n = 0 \tag{5.24}$$

Il convient, ici, de faire plusieurs remarques. Tout d'abord, le terme de tension de surface est discrétisé de manière explicite, ce qui induit une condition de stabilité spécifique dont nous parlerons dans le prochain chapitre. Ensuite, on peut aussi mettre en oeuvre des discrétisations en temps d'ordre plus élevé. Le besoin ne s'en est pas fait sentir dans les applications considérées et cela ne change pas non plus profondément la dérivation de la condition de stabilité. Enfin, dans notre code, nous avons implémenté une méthode d'Euler en temps pour

Navier-Stokes mais aussi des schémas de Runge-Kutta TVD d'ordre 2 et 3 pour discrétiser l'équation de transport (suivant en cela, les travaux de Shu et Osher [151]).

5.3.3 Solveur pour l'écoulement

La résolution de (5.22)-(5.23), pour obtenir $(\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1})$, est réalisée grâce à une méthode de Lagrangien Augmenté (*e.g.* voir [171, 30, 49]). Cette méthode provient des idées développées en programmation quadratique pour résoudre des problèmes de minimisation sous contraintes. Un problème sous contraintes est transformé, par ajout d'un multiplicateur de Lagrange, en un problème de point-selle, exempt de contrainte. Un Lagrangien classique se voit alors augmenté d'un terme quadratique pour obtenir un Lagrangien dit "Augmenté". L'avantage de cette méthode est que l'on peut obtenir la solution exacte du problème sans augmenter indéfiniment le terme de pénalisation, contrairement aux méthodes de pénalisation classiques où cela induit une dégradation du conditionnement du système à inverser. Le lecteur intéressé par l'utilisation de cette méthode pour des problèmes aux limites pourra se référer à l'ouvrage [48].

L'algorithme va ici consister à résoudre le problème de Navier-Stokes à l'aide d'une méthode itérative qui va permettre de converger vers une solution qui vérifie la contrainte d'incompressibilité. A cette fin, on note $(\mathbf{u}_{k+1}, p_{k+1})$ et $(\mathbf{u}_k, p_k)$ les variables de ce processus itératif (on aura remarqué que les indicateurs liés à la discrétisation en temps sont des n placés en exposant, alors que ceux liés aux itérés de la relaxation dans le Lagrangien Augmenté sont des k placés en indice). On réalise les étapes suivantes :

1. Initialisation de $(\mathbf{u}_0, p_0)$ (par exemple, en résolvant un problème de Stokes stationnaire)
2. Résolution du système linéaire, en $\mathbf{u}_{k+1}$:

$$\begin{aligned} &\frac{\rho}{\Delta t}\mathbf{u}_{k+1} - \nabla.(2\eta D\mathbf{u}_{k+1}) + c_1\nabla\left(\nabla.\mathbf{u}_{k+1}\right) = \\ &\frac{\rho}{\Delta t}\mathbf{u}^n - \rho\mathbf{u}^n.\nabla\mathbf{u}^n + \sigma\kappa^n\delta(\phi^n)\mathbf{n} - \nabla p_k \end{aligned} \tag{5.25}$$

3. Actualisation de la pression p_{k+1} *via*

$$p_{k+1} = p_k - c_2\nabla.\mathbf{u}_{k+1} \tag{5.26}$$

4. Itérer (2)-(3) jusqu'à la convergence
   (*i.e.* quand $|p_{k+1} - p_k| < \zeta$ ou $|\nabla.\mathbf{u}_{k+1}| < \zeta$)
5. Enfin, affecter $(\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}) = (\mathbf{u}_{k+1}, p_{k+1})$

où c_1 et c_2 sont les coefficients du Lagrangien Augmenté et ζ est le critère de convergence désiré. Dans nos calculs, nous prenons typiquement $c_1 = c_2 = 1$. Remarquons que l'étape d'initialisation (1) peut être réalisée de deux façons, suivant l'état de la simulation :

- Si l'on doit calculer l'état physique initial de la simulation et que l'on ne dispose pas d'un candidat naturel $(\mathbf{u}^0, p^0)$ (provenant par exemple d'une simulation antérieure) pour amorcer le calcul, on peut résoudre l'équation de Stokes stationnaire. Pour cela, il suffit d'appliquer l'algorithme ci-dessus avec n'importe quel $(\mathbf{u}_0, p_0)$ initial (*e.g.* $(\mathbf{u}_0, p_0) = (1\,;1)$) et d'imposer $\rho = 0$. A convergence, la solution obtenue constitue un candidat *ad hoc* que l'on peut affecter à $(\mathbf{u}^0, p^0)$ pour initialiser le calcul de l'équation de Navier-Stokes.
- Si plusieurs itérations ont déja été calculées, il suffit d'initialiser *via* $(\mathbf{u}_0, p_0) = (\mathbf{u}^n, p^n)$.

Pour fixer les idées, dans les applications en microfluidique avec un modèle de Stokes, cet algorithme de Lagrangien Augmenté converge en 4 ou 5 itérations vers la solution dont la contrainte $\nabla.\mathbf{u} = 0$ est satisfaite à l'ordre de l'approximation de la divergence, c'est-à-dire à

l'ordre deux.

Il convient ici de remarquer qu'au cours de cette thèse, deux solveurs ont été implémentés. Le premier résoud un modèle de Stokes bidimensionnel sur une géométrie en croix, avec un système de coordonnées cartésien. Le second résoud les équations de Navier-Stokes tridimensionnelles dans un cylindre, en utilisant des coordonnées cylindriques ; on suppose, qu'au sein de cette géométrie, l'écoulement est axisymétrique relativement à l'axe du cylindre, ce qui permet de réaliser les simulations sur un domaine 2D.
Dans les sections suivantes, du présent chapitre, nous allons détailler la discrétisation spatiale en considérant un système de coordonnées cartésien bidimensionnel. Le traitement des équations en coordonnées cylindriques suit la même philosophie et sera abordé au chapitre 9.

5.3.4 Discrétisation en espace

Nous adoptons une approche volumes-finis sur une grille décalée, comme dans la méthode MAC (Marker and Cell) proposée par Harlow and Welch [70] (voir Figure 5.7, a). On note respectivement Δx et Δy, les pas de discrétisation en espace dans les directions x et y. Les points au centre d'une cellule sont donc donnés par $\mathbf{x}_{i,j} = (x_i, y_j) = ((i-1/2)\Delta x; (j-1/2)\Delta y)\,;\, i = 1...nx, j = 1...ny$. La pression $p_{i,j}$ et la fonction $\phi_{i,j}$ sont données aux points $\mathbf{x}_{i,j}$ tandis que $u_{i,j}$ l'est en $\mathbf{x}_{i-1/2,j}$ et $v_{i,j}$, en $\mathbf{x}_{i,j-1/2}$ (voir Figure 5.7). On définit alors :

$$\begin{aligned} u_{i,j} &= u(x_{i-1/2}, y_j) \\ v_{i,j} &= v(x_i, y_{j-1/2}) \\ p_{i,j} &= p(x_i, y_j) \\ \phi_{i,j} &= \phi(x_i, y_j) \\ \rho_{i,j} &= \rho(x_i, y_j) \\ \eta_{i,j} &= \eta(x_i, y_j) \end{aligned}$$

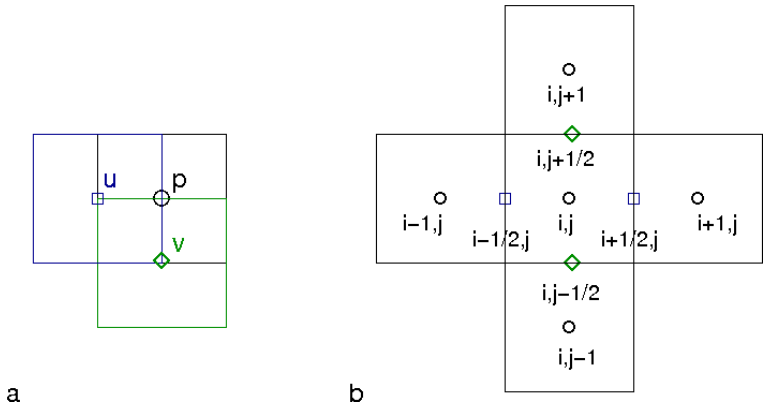


FIG. 5.7 – Maillage MAC (ou grille décalée) (a) et localisation des indices i, j (b) mentionnée dans le texte

Pour discrétiser en espace les équations (5.25)-(5.26), le maillage MAC est mis à profit pour obtenir une approximation à l'ordre deux des différents termes contenant des gradients. L'écriture d'une discrétisation volumes-finis pour (5.25) sur les deux volumes de contrôle de u et v conduit respectivement à la paire d'équations suivantes :

$$
\begin{aligned}
&\Delta x\,\Delta y\,\frac{\rho^u_{i,j}}{\Delta t}u^{k+1}_{i,j} - \frac{2\Delta y}{\Delta x}\left[\eta_{i,j}\left(u^{k+1}_{i+1,j}-u^{k+1}_{i,j}\right) - \eta_{i-1,j}\left(u^{k+1}_{i,j}-u^{k+1}_{i-1,j}\right)\right]\\
&-\Delta x\left[\tilde{\eta}^u_{i,j+1}\left(\frac{u^{k+1}_{i,j+1}-u^{k+1}_{i,j}}{\Delta y} + \frac{v^{k+1}_{i,j+1}-v^{k+1}_{i-1,j+1}}{\Delta x}\right) - \tilde{\eta}^u_{i,j}\left(\frac{u^{k+1}_{i,j}-u^{k+1}_{i,j-1}}{\Delta y} + \frac{v^{k+1}_{i,j}-v^{k+1}_{i-1,j}}{\Delta x}\right)\right]\\
&- c_1\,\Delta y\left(\frac{u^{k+1}_{i+1,j}-2u^{k+1}_{i,j}+u^{k+1}_{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{v^{k+1}_{i,j+1}-v^{k+1}_{i,j}-(v^{k+1}_{i-1,j+1}-v^{k+1}_{i-1,j})}{\Delta y}\right) =\\
&-\Delta x\,\Delta y\,\rho^u_{i,j}\,u^n_{i,j}\left[\frac{\partial u^n}{\partial x}\right]^{\text{upwd}}_{i,j} - \Delta x\,\Delta y\,\rho^u_{i,j}\,\frac{v^n_{i,j}+v^n_{i,j+1}+v^n_{i-1,j+1}+v^n_{i-1,j}}{4}\left[\frac{\partial u^n}{\partial y}\right]^{\text{upwd}}_{i,j}\\
&+\sigma\,\frac{1}{\Delta x\,\Delta y}\left[\left(n^{\phi,x}_{i,j}-n^{\phi,x}_{i-1,j}\right)\Delta y + \left(\tilde{n}^{\phi,y}_{i,j+1}-\tilde{n}^{\phi,y}_{i,j}\right)\Delta x\right]\,\Delta y\,\left(H(\phi^n_{i,j})-H(\phi^n_{i-1,j})\right)\\
&+\Delta x\,\Delta y\,\frac{\rho^u_{i,j}}{\Delta t}\,u^n_{i,j} - \Delta y\,(p^k_{i,j}-p^k_{i-1,j})
\end{aligned}
\tag{5.27}
$$

$$
\begin{aligned}
&\Delta x\,\Delta y\,\frac{\rho^v_{i,j}}{\Delta t}v^{k+1}_{i,j} - \frac{2\Delta x}{\Delta y}\left[\eta_{i,j}\left(v^{k+1}_{i,j+1}-v^{k+1}_{i,j}\right) - \eta_{i,j-1}\left(v^{k+1}_{i,j}-v^{k+1}_{i,j-1}\right)\right]\\
&-\Delta y\left[\tilde{\eta}^v_{i+1,j}\left(\frac{u^{k+1}_{i+1,j}-u^{k+1}_{i+1,j-1}}{\Delta y} + \frac{v^{k+1}_{i+1,j}-v^{k+1}_{i,j}}{\Delta x}\right) - \tilde{\eta}^v_{i,j}\left(\frac{u^{k+1}_{i,j}-u^{k+1}_{i,j-1}}{\Delta y} + \frac{v^{k+1}_{i,j}-v^{k+1}_{i-1,j}}{\Delta x}\right)\right]\\
&- c_1\,\Delta x\left(\frac{u^{k+1}_{i+1,j}-u^{k+1}_{i,j}-(u^{k+1}_{i+1,j-1}-u^{k+1}_{i,j-1})}{\Delta x} + \frac{v^{k+1}_{i,j+1}-2v^{k+1}_{i,j}+v^{k+1}_{i,j-1}}{\Delta y}\right) =\\
&-\Delta x\,\Delta y\,\rho^v_{i,j}\,\frac{u^n_{i,j}+u^n_{i+1,j}+u^n_{i+1,j-1}+u^n_{i,j-1}}{4}\left[\frac{\partial v^n}{\partial x}\right]^{\text{upwd}}_{i,j} - \Delta x\,\Delta y\,\rho^v_{i,j}\,v^n_{i,j}\left[\frac{\partial v^n}{\partial y}\right]^{\text{upwd}}_{i,j}\\
&+\sigma\,\frac{1}{\Delta x\,\Delta y}\left[\left(\tilde{n}^{\phi,x}_{i+1,j}-\tilde{n}^{\phi,x}_{i,j}\right)\Delta y + \left(n^{\phi,y}_{i,j}-n^{\phi,y}_{i,j-1}\right)\Delta x\right]\,\Delta x\,\left(H(\phi^n_{i,j})-H(\phi^n_{i,j-1})\right)\\
&+\Delta x\,\Delta y\,\frac{\rho^v_{i,j}}{\Delta t}\,v^n_{i,j} - \Delta x\,(p^k_{i,j}-p^k_{i,j-1})
\end{aligned}
\tag{5.28}
$$

De même, en considérant le volume de contrôle de p, l'équation (5.26) se discrétise ainsi :

$$
p^{k+1}_{i,j} = p^k_{i,j} - c_2\left(\frac{u^{k+1}_{i+1,j}-u^{k+1}_{i,j}}{\Delta x} + \frac{v^{k+1}_{i,j+1}-v^{k+1}_{i,j}}{\Delta y}\right) \tag{5.29}
$$

Nous allons maintenant détailler les nouvelles variables introduites dans (5.27)-(5.28). Tout d'abord, considérons l'intégration de la première composante de (5.25) sur le volume de contrôle $\mathcal{V}^u_c$ de u (voir Figure 5.8).
La viscosité $\tilde{\eta}^u_{i,j}$ est définie, au point $\mathbf{x}_{i-1/2,j-1/2}$, par la moyenne :

$$
\tilde{\eta}^u_{i,j} = \frac{\eta_{i-1,j}\,\eta_{i-1,j-1}}{\eta_{i-1,j}+\eta_{i-1,j-1}} + \frac{\eta_{i,j-1}\,\eta_{i,j}}{\eta_{i,j-1}+\eta_{i,j}} \tag{5.30}
$$

Nous faisons remarquer que (5.30) est un choix qui permet d'assurer la continuité des flux lorsque le problème 2D exhibe une configuration 1D dans l'une des directions du maillage. En ce qui concerne, le problème 2D général, il n'existe pas, à notre connaissance dans la littérature, de résultats donnant une formulation pour cette variable auxiliaire qui assure, avec un maillage MAC, la continuité des flux sur les arrêtes, pour n'importe quelle configuration d'écoulement. Quant à la densité $\rho^u{}_{i,j}$, elle est définie au point $\mathbf{x}_{i-1/2,j}$ (*i.e.* au centre de $\mathcal{V}^u_c$) et se calcule en deux étapes :

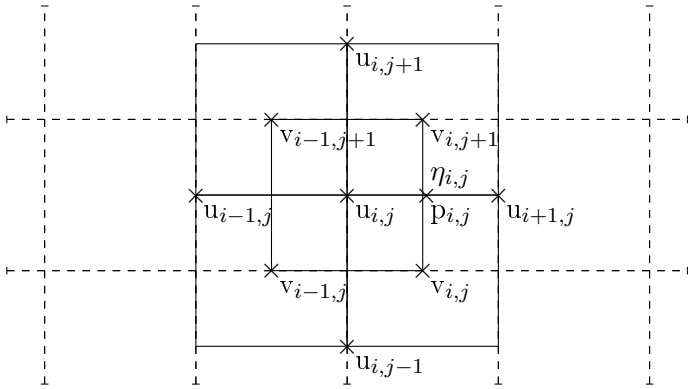


FIG. 5.8 – Volume de contrôle de $u_{i,j}$. Les traits en pointillés représentent le maillage physique.

1. $\tilde{\rho}^u_{i,j}$ est obtenue avec la relation (5.30), en replaçant η par ρ
2. on en déduit ${\rho^u}_{i,j}$ en prenant la moyenne centrée :

$$ {\rho^u}_{i,j} = \frac{\rho_{i,j} + \rho_{i-1,j} + \tilde{\rho}^u_{i,j} + \tilde{\rho}^u_{i,j+1}}{4} \tag{5.31} $$

Ensuite, attachons-nous à l'intégration de la seconde composante de (5.25) sur le volume de contrôle $\mathcal{V}^v_c$ de v. La viscosité $\tilde{\eta}^v_{i,j}$ est aussi définie, au point $\mathbf{x}_{i-1/2,j-1/2}$, par :

$$ \tilde{\eta}^v_{i,j} = \frac{\eta_{i-1,j-1}\,\eta_{i,j-1}}{\eta_{i-1,j-1} + \eta_{i,j-1}} + \frac{\eta_{i-1,j}\,\eta_{i,j}}{\eta_{i-1,j} + \eta_{i,j}} \tag{5.32} $$

La densité ${\rho^v}_{i,j}$ est définie au point $\mathbf{x}_{i,j-1/2}$ (*i.e.* au centre de $\mathcal{V}^v_c$) et se calcule en deux temps :

1. $\tilde{\rho}^v_{i,j}$ est déterminée avec la même moyenne que (5.32), en replaçant η par ρ
2. ${\rho^v}_{i,j}$ s'obtient *via* :

$$ {\rho^v}_{i,j} = \frac{\rho_{i,j} + \rho_{i,j-1} + \tilde{\rho}^v_{i,j} + \tilde{\rho}^v_{i+1,j}}{4} \tag{5.33} $$

En ce qui concerne le terme de tension de surface $\sigma\kappa\delta(\phi)\mathbf{n} = \sigma\kappa\nabla H(\phi)$, nous allons tout d'abord nous concentrer sur l'intégration de sa première composante, *i.e.* $\sigma\kappa\frac{\partial H}{\partial x}(\phi)$, sur $\mathcal{V}^u_c$. On utilise l'approximation suivante :

$$ \begin{aligned} \int_{\mathcal{V}^u_c} \sigma\kappa\frac{\partial H}{\partial x}(\phi) &= \sigma\int_{\mathcal{V}^u_c} \nabla.\mathbf{n}\,\frac{\partial H}{\partial x}(\phi) \\ &\approx \sigma\frac{\int_{\mathcal{V}^u_c}\nabla.\mathbf{n}}{\Delta x\,\Delta y}\int_{\mathcal{V}^u_c}\frac{\partial H}{\partial x}(\phi) \end{aligned} \tag{5.34} $$

En appliquant la formule de Green sur la seconde intégrale, il vient :

$$ \int_{\mathcal{V}^u_c}\frac{\partial H}{\partial x}(\phi) = \Delta y\,\left(H(\phi^n_{i,j}) - H(\phi^n_{i-1,j})\right) \tag{5.35} $$

et sur la première intégrale, on a :

$$ \int_{\mathcal{V}^u_c}\nabla.\mathbf{n} = \left(n^{\phi,x}_{i,j} - n^{\phi,x}_{i-1,j}\right)\Delta y + \left(\tilde{n}^{\phi,y}_{i,j+1} - \tilde{n}^{\phi,y}_{i,j}\right)\Delta x \tag{5.36} $$

où $n_{i,j}^{\phi,x}$ est la première composante de la normale au point $\mathbf{x}_{i,j}$ et $\tilde{n}_{i,j}^{\phi,y}$, la seconde composante de la normale au point $\mathbf{x}_{i-1/2,j-1/2}$. La fusion des relations (5.34)-(5.36) conduit à l'expression du terme de tension de surface donné dans (5.27). La même procédure est appliquée pour la seconde composante du terme de tension de surface, *i.e.* $\sigma\kappa\frac{\partial H}{\partial y}(\phi)$, qui est intégrée sur $\mathcal{V}_c^v$. Elle apparaît dans l'équation (5.28).

Le calcul des composantes des normales évoquées à l'instant met à profit le caractère global de la fonction *Level Set* et des prises de moyennes. La procédure est la suivante :

1. Calcul de :
$$\tilde{\phi}_{i,j} = \frac{\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i-1,j-1} + \phi_{i,j-1}}{4} \tag{5.37}$$
2. Calcul de :
$${\phi^u}_{i,j} = \frac{\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j} + \tilde{\phi}_{i,j} + \tilde{\phi}_{i,j+1}}{4} \tag{5.38}$$
3. Calcul de :
$${\phi^v}_{i,j} = \frac{\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1} + \tilde{\phi}_{i,j} + \tilde{\phi}_{i+1,j}}{4} \tag{5.39}$$
4. Calcul de $\mathbf{n} = (n^{\phi,x}; n^{\phi,y})$ au point $\mathbf{x}_{i,j}$:
$$n_{i,j}^{\phi,x} = \frac{{\phi^u}_{i+1,j} - {\phi^u}_{i,j}}{\Delta x} \qquad n_{i,j}^{\phi,y} = \frac{{\phi^v}_{i,j+1} - {\phi^v}_{i,j}}{\Delta y} \qquad \text{puis normalisation} \tag{5.40}$$
5. Calcul de $\tilde{\mathbf{n}} = (\tilde{n}^{\phi,x}; \tilde{n}^{\phi,y})$ au point $\mathbf{x}_{i-1/2,j-1/2}$:
$$\tilde{n}_{i,j}^{\phi,x} = \frac{{\phi^v}_{i,j} - {\phi^v}_{i-1,j}}{\Delta x} \qquad \tilde{n}_{i,j}^{\phi,y} = \frac{{\phi^u}_{i,j} - {\phi^u}_{i,j-1}}{\Delta y} \qquad \text{puis normalisation} \tag{5.41}$$

Enfin, les termes convectifs, labélisés $[.]^{upwd}$, sont discrétisés à l'aide d'une méthode ENO d'ordre deux, suivant en cela [152]. Ceci clôt la description de toutes les variables introduites dans (5.27)-(5.28).

Le système linéaire (5.27)-(5.28) induit par le Lagrangien Augmenté est résolu grâce à la méthode du BiGradient Conjugué (BiCGstab) [185].

Nous décrivons maintenant la discrétisation spatiale de l'équation *Level Set* (5.24), en omettant momentanément l'exposant $n+1$ sur $\mathbf{u}$ et en développant le gradient bidimensionnel :
$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + u\frac{\partial \phi^n}{\partial x} + v\frac{\partial \phi^n}{\partial y} = 0 \tag{5.42}$$
On adopte l'approche présentée au chapitre 3 en notant respectivement ϕ_x^+ et ϕ_x^- les dérivées discrètes à droite et à gauche de $\frac{\partial \phi^n}{\partial x}$. La discrétisation *upwind* s'écrit :
$$\begin{cases} \text{si } u(x_i, y_j) > 0 \quad \text{alors} \quad \frac{\partial \phi^n}{\partial x} = \phi_x^- \\ \text{si } u(x_i, y_j) < 0 \quad \text{alors} \quad \frac{\partial \phi^n}{\partial x} = \phi_x^+ \\ \text{si } u(x_i, y_j) = 0 \quad \text{alors} \quad \text{le choix est indifférent} \end{cases} \tag{5.43}$$
Les valeurs de $\phi_x^{+,-}$ sont calculées au point $\mathbf{x}_{i,j}$ à l'aide du schéma WENO5 détaillé au chapitre 3. Ayant à l'esprit qu'une grille décalée est utilisée, il est nécessaire de déterminer la vitesse u au point $\mathbf{x}_{i,j}$, où $\phi_{i,j}$ est donné. Pour cela, on prend naturellement une moyenne centrée :
$$u(x_i, y_j) = \frac{u_{i,j} + u_{i+1,j}}{2} \tag{5.44}$$

On procède de manière identique pour $v\frac{\partial \phi^n}{\partial y}$ en prenant :

$$v(x_i, y_j) = \frac{v_{i,j} + v_{i,j+1}}{2} \tag{5.45}$$

5.3.5 Traitement des conditions aux limites

Dans cette section, on se propose de détailler le traitement des conditions aux limites en l'illustrant sur le cas d'une géométrie en croix (comme sur la Figure 5.4). C'est en effet l'une des configurations traitées dans les applications en microfluidique. De plus, pour simplifier la présentation, nous considérons le cas particulier du problème de Stokes stationnaire sans tension de surface :

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\nabla . \left(2\eta\, D\mathbf{u}\right) + \nabla \mathbf{p} & = & 0 \quad \text{dans } \Omega \subset \mathbb{R}^2 & (i) \\ \nabla . \mathbf{u} & = & 0 \quad \text{dans } \Omega & (ii) \end{array} \right. \tag{5.46}$$

Cette situation très épurée conserve néanmoins les mêmes aspects pour le traitement des bords que le problème complet (5.11). *Mutatis mutandis*, elle traduit donc bien l'approche numérique que nous avons utilisée pour tous ces cas.

De même, on suppose que le glissement est donné par une condition de Robin (on parle aussi de condition de Navier) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}.\tau_\Omega = L_s(\eta)\frac{\partial(\mathbf{u}.\tau_\Omega)}{\partial \mathbf{n}_\Omega} \\ \mathbf{u}.\mathbf{n}_\Omega = 0 \end{array} \right. \tag{5.47}$$

Gardons, par ailleurs, à l'esprit que ce traitement s'inscrit dans la construction du système linéaire induit par l'algorithme du Lagrangien Augmenté. Dans le cas du problème de Stokes (5.46), les équations discrètes qui conduisent à ce système se dérivent de la même manière que pour (5.27) et (5.28) et sont respectivement :

$$\begin{aligned} &-\frac{2\Delta y}{\Delta x}\left[\eta_{i,j}\,\left(u_{i+1,j}-u_{i,j}\right) - \eta_{i-1,j}\,\left(u_{i,j}-u_{i-1,j}\right)\right] \\ &-\Delta x\left[\tilde{\eta}^u_{i,j+1}\left(\frac{u_{i,j+1}-u_{i,j}}{\Delta y} + \frac{v_{i,j+1}-v_{i-1,j+1}}{\Delta x}\right) - \tilde{\eta}^u_{i,j}\left(\frac{u_{i,j}-u_{i,j-1}}{\Delta y} + \frac{v_{i,j}-v_{i-1,j}}{\Delta x}\right)\right] \\ &\quad - c_1\Delta y\left(\frac{u_{i+1,j}-u_{i,j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1}-v_{i,j}}{\Delta y} - \frac{u_{i,j}-u_{i-1,j}}{\Delta x} - \frac{v_{i-1,j+1}-v_{i-1,j}}{\Delta y}\right) \\ &\qquad\qquad = -\Delta y\left(p^k_{i,j}-p^k_{i-1,j}\right) \end{aligned} \tag{5.48}$$

$$\begin{aligned} &-\frac{2\Delta x}{\Delta y}\left[\eta_{i,j}\,\left(v_{i,j+1}-v_{i,j}\right) - \eta_{i,j-1}\,\left(v_{i,j}-v_{i,j-1}\right)\right] \\ &-\Delta y\left[\tilde{\eta}^v_{i+1,j}\left(\frac{u_{i+1,j}-u_{i+1,j-1}}{\Delta y} + \frac{v_{i+1,j}-v_{i,j}}{\Delta x}\right) - \tilde{\eta}^v_{i,j}\left(\frac{u_{i,j}-u_{i,j-1}}{\Delta y} + \frac{v_{i,j}-v_{i-1,j}}{\Delta x}\right)\right] \\ &\quad - c_1\Delta x\left(\frac{u_{i+1,j}-u_{i,j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1}-v_{i,j}}{\Delta y} - \frac{u_{i+1,j-1}-u_{i,j-1}}{\Delta x} - \frac{v_{i,j}-v_{i,j-1}}{\Delta y}\right) \\ &\qquad\qquad = -\Delta x\left(p^k_{i,j}-p^k_{i,j-1}\right) \end{aligned} \tag{5.49}$$

où, pour alléger les notations, on a omis les exposants k sur les inconnues u et v.

Sur les mailles qui bordent le domaine de calcul, ce type d'équation nécessitent de traiter des cas particuliers que nous allons voir dès maintenant.

Les implémentations possibles

Nous allons naturellement distinguer les conditions sur les parois solides du domaine ainsi que sur les bords d'injection et de sortie du fluide.

(a) paroi solide

Considérons, par exemple, une **maille en** u tangente à une **paroi horizontale** inférieure de la croix (*cf.* Figure 5.9). Le raisonnement serait identique pour une paroi supérieure et, pour une paroi verticale, il suffit d'inverser le rôle de u et v, de par la nature du maillage décalé. Cette maille est entièrement dans le domaine fluide. Il n'est donc pas judicieux de

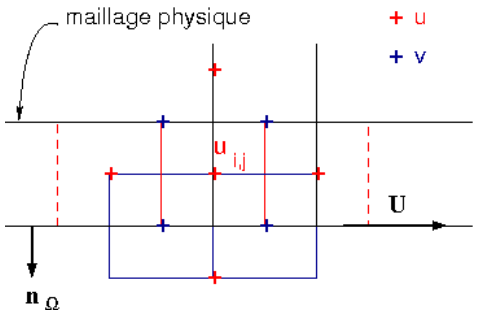


FIG. 5.9 – Maille en u tangente à une paroi horizontale

vouloir écrire une équation sur $u_{i,j}$ en ne faisant appel qu'à la condition de Robin. En effet, il est plus naturel d'utiliser, sur cette maille, l'équation complète (5.48). Cependant, celle-ci fait intervenir le nœud $u_{i,j-1}$ qui est en dehors du domaine et ne fait pas partie de notre *pool* de nœuds discrétisés. C'est la condition de Robin (5.47) qui va nous permettre de l'exprimer en fonction des nœuds dont on dispose. Dans le cas considéré ici, (5.47) s'écrit $v|_{bord} = 0$ et

$$\left.\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}_\Omega}\right|_{bord} = \alpha(\eta)\, u|_{bord} \tag{5.50}$$

En prenant garde au sens de la normale, pour le calcul de la dérivée suivant $\mathbf{n}_\Omega$, on a l'approximation à l'ordre 2 :

$$\frac{u_{i,j-1} - u_{i,j}}{\Delta y} = \alpha(\eta)\, \frac{u_{i,j} + u_{i,j-1}}{2} \quad \text{d'où} \tag{5.51}$$

$$u_{i,j-1} = \frac{1 + \frac{\Delta y \alpha(\eta)}{2}}{1 - \frac{\Delta y \alpha(\eta)}{2}}\, u_{i,j} \tag{5.52}$$

On peut alors réinjecter (5.52) dans (5.48).

On obtient, de la même manière, la valeur de $u_{i,j+1}$ nécessaire pour l'écriture de l'équation (5.48) sur une maille du bord supérieur d'une branche horizontale de la croix :

$$u_{i,j+1} = \frac{1 + \frac{\Delta y \alpha(\eta)}{2}}{1 - \frac{\Delta y \alpha(\eta)}{2}}\, u_{i,j} \tag{5.53}$$

Quant à la **maille en** v, le nœud $v_{i,j}$ coïncide avec le bord et vérifie la condition de Dirichlet homogène de (5.47). On écrit donc simplement : $0 = v|_{bord} = v_{i,j}$

Si l'on considère un **bord vertical**, comme évoqué au début de ce **(a)**, les nœuds en u sont affectés de la condition de Dirichlet homogène alors que l'on écrit l'équation (5.49) sur une maille en v. Il est alors nécessaire d'exprimer $v_{i-1,j}$ (resp. $v_{i+1,j}$) sur un bord gauche (resp. droit). Le même raisonnement que ci-dessus conduit, en prenant garde au sens de la dérivée normale dans la condition de Robin, à :

$$v_{i\pm1,j} = \frac{1 + \frac{\Delta x \alpha(\eta)}{2}}{1 - \frac{\Delta x \alpha(\eta)}{2}} v_{i,j} \tag{5.54}$$

(b) bord d'injection

Pour ce cas, nous considérons, par exemple, l'entrée dans la branche gauche de la croix (*cf.* Figure 5.10). En tenant compte de la description faite à la section 5.2, on se donne la vitesse $\mathbf{u} = (u, v)^t$ au bord suivante :

$$\left\{ \begin{array}{rcll} u(y) & = & V_{max} \left(1 - \frac{4y^2}{a^2}\right) & \forall y \in [-y_0; y_0] \\ v(y) & = & 0 & \forall y \in [-y_0; y_0] \end{array} \right. \tag{5.55}$$

Les nœuds $u_{i,j}$, situés sur le bord, se voient donc affectés la condition de Dirichlet non homogène. Cependant, il faut garder à l'esprit que, dans un cadre volume-fini, $u_{i,j} = \int_{M_{i,j}} u$. Par conséquent, en invoquant l'hypothèse physique de constance de u dans la direction x à l'injection, la valeur de $u_{i,j}$ doit être la prise de moyenne :

$$u_{i,j} = (\Delta x)^{-1} \int_{j\,\Delta x}^{(j+1)\Delta x} \underbrace{u(y)}_{\text{défini par (5.55)}} \, dy \tag{5.56}$$

Remarquons que l'on pourrait choisir d'écrire l'équation (5.48) comme nous le verrons pour une maille en v au **(c)** suivant.

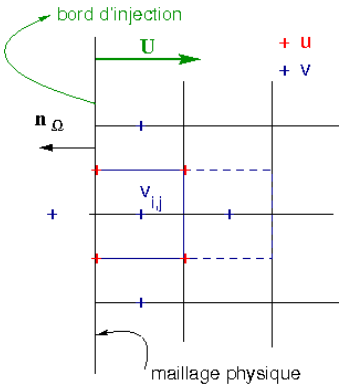


FIG. 5.10 – Maille en v tangente au bord d'injection

Quant aux nœuds en v, leurs mailles sont tangentes au bord et plusieurs choix peuvent être adoptés pour l'implémentation :

- on peut "forcer" une condition de Dirichlet en affectant $v_{i,j} = 0$. L'inconvénient de ce choix est qu'il est dépendant du raffinement de maillage.

- la maille en v étant complètement dans le domaine, on peut écrire l'équation (5.49) qui fait intervenir le point hors domaine $v_{i-1,j}$. Les alternatives suivantes apparaissent :
  - on peut étendre la condition valable au bord en invoquant l'uniformité de l'écoulement en amont et jusqu'au bord ; on a alors : $v_{i-1,j} = 0$; l'inconvénient est le même que précédemment ;
  - on exprime une relation entre $v_{i-1,j}$ et les nœuds internes ; par exemple, on peut approcher la valeur de v au bord par une moyenne arithmétique : $v|_{bord} = (v_{i-1,j} + v_{i,j})/2$ et compte tenu de la condition aux limites, $v|_{bord} = 0$, on en déduit :

$$v_{i-1,j} = -v_{i,j} \tag{5.57}$$

    l'avantage de ce choix est l'ordre 2 de l'approximation au point milieu.

Ce raisonnement s'étend sans difficulté à l'injection dans le bras droit de la croix ainsi que dans le bras supérieur où il faut, bien sûr, intervertir le rôle de u et v.

(c) bord de sortie

Pour la branche inférieure de la croix que nous considérons, la condition de sortie coïncide avec les mailles en v dont les nœuds $v_{i,j}$ sont exactement sur le bord du domaine physique. Par (5.47), on a :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \partial_y v & = & 0 \\ u & = & 0 \end{array} \right. \tag{5.58}$$

Pour les **mailles en** u, tangentes au bord de sortie, il existe plusieurs choix :

- on peut "forcer" une condition de Dirichlet en affectant $u_{i,j} = 0$;
- la maille en u étant complètement dans le domaine, on peut écrire l'équation (5.48) qui fait intervenir le point hors domaine $u_{i,j-1}$. De nouveau :
  - on peut étendre la condition valable au bord en invoquant l'uniformité de l'écoulement en aval depuis le bord ; on a alors : $u_{i,j-1} = 0$;
  - on exprime une relation entre $u_{i,j-1}$ et les nœuds internes ; par exemple, on peut approcher la valeur de u au bord par une moyenne arithmétique : $u|_{bord} = (u_{i,j} + u_{i,j-1})/2$ et compte tenu de la condition aux limites $u|_{bord} = 0$, on en déduit :

$$u_{i,j-1} = -u_{i,j} \tag{5.59}$$

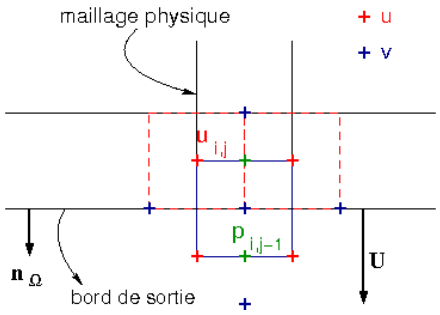


FIG. 5.11 – Maille en v au bord d'éjection

En ce qui concerne les **mailles en** v, nous avons une condition de Neumann au bord et les choix sont encore plus riches :

- on peut "forcer" une condition de Dirichlet en affectant $v_{i,j}$ à la valeur du Poiseuille en sortie (somme des trois injections) ; ce choix n'est pas en accord avec le Neumann évoqué mais en monofluide, c'est un choix consistant qui permet de réaliser des tests numériques comme nous allons le faire dans la suite ;
- on peut écrire directement la condition de Neumann et en déduire une équation entre $v_{i,j}$ et $v_{i,j+1}$ qu'il suffit d'implémenter dans l'opérateur. On a l'approximation à l'ordre 1 :

$$0 = \left.\frac{\partial v}{\partial y}\right|_{bord} = \frac{v_{i,j} - v_{i,j+1}}{\Delta y} \quad \text{d'où}$$

$$v_{i,j} - v_{i,j+1} = 0 \tag{5.60}$$

  cette dernière équation permettant de conserver une valeur propre positive dans l'opérateur ;
- on peut écrire l'équation complète (5.49) qui fait intervenir les points hors domaine $v_{i,j-1}$, $u_{i,j-1}$ et $u_{i+1,j-1}$ ainsi que $p_{i,j-1}$ (*cf.* Figure 5.11). Ceci ouvre de nouvelles perspectives :
  - pour $u_{i,j-1}$ et $u_{i+1,j-1}$ il faut bien entendu choisir la même approche que celle adoptée pour écrire la condition aux limites sur la maille en u ;
  - pour $v_{i,j-1}$, , une approximation à l'ordre 2 de la condition de flux donne :

$$\frac{v_{i,j-1} - v_{i,j+1}}{2\Delta y} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad v_{i,j-1} = v_{i,j+1} \tag{5.61}$$

  - pour exprimer la pression, nous avons proposé deux options :
    - l'une exploitant l'incompressibilité de l'écoulement et basée sur la condition physiquement admissible :

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_\Omega}(\nabla p) = 0 \tag{5.62}$$

      qui permet d'écrire :

$$\frac{p_{i,j-1} - p_{i,j}}{\Delta y} = \frac{p_{i,j} - p_{i,j+1}}{\Delta y} \quad \Longleftrightarrow \quad p_{i,j-1} = 2p_{i,j} - p_{i,j+1} \tag{5.63}$$

    - l'autre basée sur une réactualisation en accord avec le Lagrangien Augmenté et l'utilisation de conditions aux limites particulières en $u_{i,j}$ que nous décrirons plus loin :

$$p^{new}_{i,j-1} = p^{old}_{i,j-1} + c_2\, div(\mathbf{u}^{new}_{i,j}) \tag{5.64}$$

Une étude numérique

Nous avons mené une étude numérique pour observer l'*influence* des différentes conditions aux limites, pour les bords $\partial\Omega_{inj}$ et $\partial\Omega_{out}$, présentées ci-dessus, sur la *vitesse de convergence* du solveur utilisant la méthode du Lagrangien Augmenté.

Nous nous sommes placés dans un cadre monofluide en prenant $\eta_1 = \eta_2 = \eta$. De plus, nous considérons des grandeurs caractéristiques d'ordre un :

- $\eta = 1$ kg.m^{-1}.s^{-1} ;
- vitesses d'injection de type Poiseuille dont le maximum vaut 1 m.s^{-1} ;
- section d'injection de diamètre 1 m ;
- les branches de la croix ont une longueur égale à quatre fois leur diamètre soit 4 m ;
- on discrétise avec 5 mailles dans une section de canal, ce qui conduit à 940 inconnues.

Nous avons construit cinq tests numériques (nommés D1 à D5) combinant différents types de conditions aux limites. Le premier cas test, D1, ne correspond pas tout à fait au problème de Stokes étudié car on utilise une condition de Dirichlet en sortie sur les deux composantes de la vitesse. Ce cas a été traité pour avoir une vitesse de convergence de référence pour le Lagrangien Augmenté. Pour les autres cas, D2 à D5, nous avons testé différentes implémentations des conditions aux bords du problème considéré. Le tableau 5.1 récapitule les choix adoptés. Dans ce tableau, la mention "id" signifie que le choix est le même que pour le cas test précédent et fait donc référence à la cellule voisine de la *colonne* précédente. Les lettres utilisées pour repérer les bords font référence aux points cardinaux associés aux branches de la croix, soit W,E,N et S pour, respectivement, les branches ouest, est, nord et sud. Nous avons en fait augmenté les degrés de liberté au cours des tests successifs ; le cas D1 étant, bien sûr, le plus contraignant puisque traité entièrement en Dirichlet. Le *design* de ces tests est motivé par la recherche d'une influence éventuelle, de l'introduction de degrés de liberté dans les conditions aux limites, sur la vitesse de convergence du solveur.

Bord	Maille	D1	D2	D3	D4	D5
Entrée W/E	u	Dirichlet : Poiseuille	id	id	id	id
	v	Dirichlet : $v_{i,j}$=0	id	id	id	Equation (5.49) avec $v_{i\pm1,j} = -v_{i,j}$
Entrée N	u	Dirichlet : $u_{i,j}$=0	id	id	id	Equation (5.48) avec $u_{i,j+1} = -u_{i,j}$
	v	Dirichlet : Poiseuille	id	id	id	id
Sortie S	u	Dirichlet : $u_{i,j}$=0	id	Equation (5.48) avec $u_{i,j-1}=-u_{i,j}$	id	id
	v	Dirichlet : Poiseuille	Equation Neumann $v_{i,j+1} - v_{i,j}$=0	(5.49) + (5.59) + (5.61) + (5.63)	(5.49) + (5.59) + (5.61) + (5.64)	id
	p	×	×	×	(5.64)	id

TAB. 5.1 – Synthèse des conditions aux limites des cas-test

On peut en effet se demander si trop de liberté ne détériore pas la convergence. Les résultats de cette étude sont donnés dans la Figure 5.12. Les convergences les plus basses correspondent à la précision machine. On constate la franche supériorité de D1 sur toutes les autres méthodes. Le choix D2 est légèrement plus rapide que D4 et D5 qui sont pratiquement similaires. Le choix D3, ne permet pas, quant à lui, de faire descendre la divergence au zéro machine. C'est suite à cet échec que nous avons introduit le traitement (5.64) du terme en pression hors du domaine. Nous allons maintenant développer ce point.

Tout d'abord, il faut rappeler que nous disposons d'un problème bien posé avec des condi-

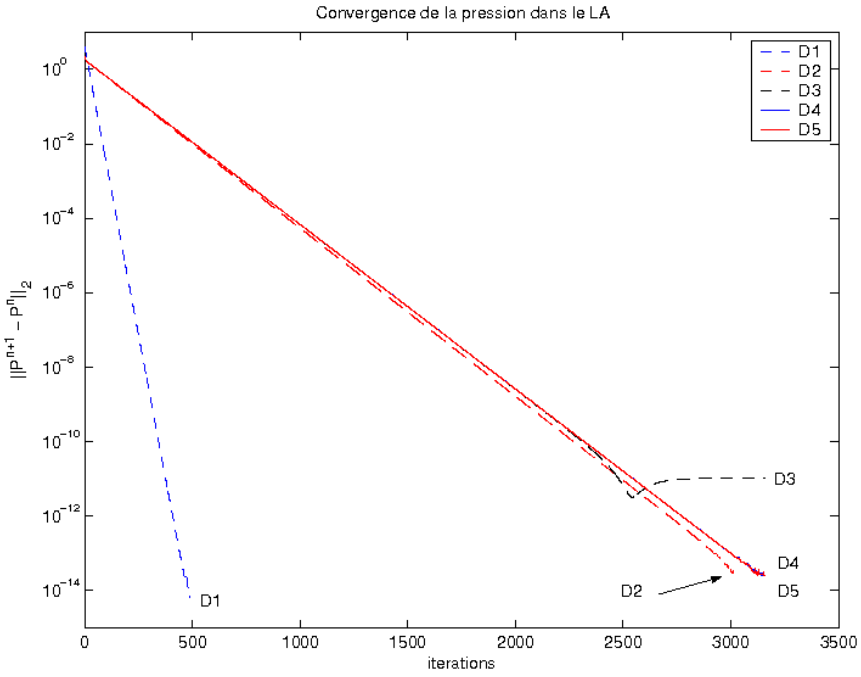


FIG. 5.12 – vitesse de convergence et conditions aux limites

tions aux limites utilisant exclusivement les deux composantes de la vitesse. En toute rigueur, il est donc interdit d'ajouter une condition en pression. Aussi, lorsque nous introduisons la condition (5.62) sur la pression, le problème peut devenir surdéterminé. Il se peut en effet que cette condition supplémentaire en pression soit incompatible avec celle en vitesse.

C'est en se replaçant dans le contexte du Lagrangien Augmenté (LA) que l'on s'aperçoit de la maladresse de ce choix, même si, d'un point de vue physique, il est cohérent. En effet, cette condition est valide pour l'écoulement établi mais, dans un LA, on utilise une méthode itérative pour converger en pression vers l'écoulement à divergence nulle. En d'autres termes, au début du LA, la divergence n'est pas nulle donc l'hypothèse de constance du gradient normal de pression est fausse. C'est ici que ce choix induit une incompatibilité puisqu'en imposant $\partial_{\mathbf{n}_\Omega}(\partial_y p) = 0$ alors que, lors des premières itérations, il ne l'est pas, on rajoute en fait un terme source dans le système qu'on résoud. Par suite, on peut ne pas capter la bonne constante pour $\partial_y p$ (on pourrait étudier plus en détails l'asymptotique du terme en pression).

En revanche, la condition (5.64) n'induit pas d'incompatibilité car elle est construite en utilisant les seules conditions aux limites en vitesse et l'équation en pression du LA pour en déduire la valeur de $p_{i,j-1}$. En effet, on a (*cf.* Figure 5.11), en notant M la maille en pression de $p_{i,j}$ et M^* celle de $p_{i,j-1}$:

$$div(\mathbf{u})|_M = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta y} \tag{5.65}$$

$$div(\mathbf{u})|_{M^*} = \frac{u_{i+1,j-1} - u_{i,j-1}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j} - v_{i,j-1}}{\Delta y} \tag{5.66}$$

mais en utilisant les équations (5.59) et (5.61), on obtient :

$$div(\mathbf{u})|_{M^*} = -\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} - \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta y} \tag{5.67}$$

$$= -div(\mathbf{u})|_M \tag{5.68}$$

L'utilisation de l'équation en pression (5.26) à $p_{i,j-1}$ donne alors :

$$p_{i,j-1}^{k+1} = p_{i,j-1}^{k} + c_2\, div(\mathbf{u}_{i,j}^{k+1}) \tag{5.69}$$

Enfin, si à (5.69), on retranche l'équation sur $p_{i,j}$:

$$p_{i,j}^{k+1} = p_{i,j}^{k} - c_2\, div(\mathbf{u}_{i,j}^{k+1}) \tag{5.70}$$

on obtient formellement :

$$\partial_y p|_{bord}^{k+1} - \partial_y p|_{bord}^{k} = -2c_2\, div(\mathbf{u}_{M}^{k+1}) \tag{5.71}$$

ce qui montre que la constance du gradient de pression, relativement à la variable y (i.e. normalement au bord) n'est atteinte que lorsque la contrainte $div(\mathbf{u}_M^{k+1}) = 0$ est réalisée ; c'est-à-dire, à la convergence du Lagrangien Augmenté et non dès les premières itérations de cet algorithme comme c'est le cas avec la condition (5.63).

Dans le cas test D3, utilisant la condition (5.63), le solveur converge vers une solution à divergence constante mais non nulle : la norme du gradient normal de pression en sortie a été attirée vers une constante différente de celle qu'on obtiendrait avec (5.69) (identique à (5.64)) et empêche de satisfaire la contrainte sur la divergence.

Les choix adoptés

Les conditions aux limites définies par le cas test D5 sont utilisées dans nos simulations.

Ainsi, au cours de ce chapitre, nous avons présenté les modèles bifluides utilisés pour déterminer le champ de vitesse qui induit le déplacement de nos interfaces. Ensuite, nous avons présenté les approches adoptées pour discrétiser ces équations, traiter les conditions aux limites et obtenir numériquement les caractéristiques de l'écoulement que sont la vitesse et la pression.

Notons que dans cette thèse, nous avons entièrement développé et implémenté tous les outils et méthodes présentés jusqu'à présent (le qualificatif "*from scratch*" est ici particulièrement adapté). Leur couplage a permis de réaliser des simulations de suivi d'interface en géométrie bidimensionnelle, notamment pour des canaux en forme de croix. Nous reparlerons de ces développements par la suite.

Cependant, dans l'approche numérique que nous venons de décrire, nous avons éludé un point important, nécessaire au bon déroulement d'une simulation, à savoir, la dépendance du pas de discrétisation en temps vis-à-vis du pas d'espace. C'est justement l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 6

Une nouvelle condition de stabilité numérique

6.1 Etat de l'art

Au chapitre précédent nous avons présenté la formulation *Level Set* (5.11) (5.6) (5.7) qui permet de simuler l'évolution d'une interface bifluide sous l'action d'un champ de vitesse vérifiant les équations de Navier-Stokes associées aux écoulements incompressibles. La discrétisation de ce problème a notamment traité, comme nous l'avions fait remarqué, le terme de tension de surface de manière explicite. Il s'agit là d'une approche tout à fait commune puisqu'il n'existe pas encore, à notre connaissance, de schéma dont la formulation est totalement implicite pour ce terme (dans la suite, nous mentionnerons cependant certains travaux qui ont permis de progresser dans cette voie).

Au même titre que les termes convectifs, les termes visqueux ou les termes sources (dont elle fait partie) qui sont traités de manière explicite, la tension de surface induit une condition de stabilité liant le pas de temps Δt et le pas d'espace Δx. Le représentant le plus connu de ce type de relation est probablement la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). En ce qui concerne la tension de surface, la contrainte sur le pas de temps permet d'éviter l'amplification des ondes capillaires sur l'interface, qui pourraient alors déstabiliser le calcul.

La plupart des méthodes de suivi d'interface qui adoptent une telle approche découplée (de la résolution de l'écoulement et du transport de l'interface) avec un traitement explicite de la tension de surface, utilisent la condition de stabilité proposée dans l'article fondateur de Brackbill, Kothe et Zemach [17], où est introduite l'approche CSF (dont nous avons déjà parlée). A notre connaissance, c'est l'un des premiers travaux dans lequel est proposée une telle condition et sa justification, avec des arguments heuristiques. Les publications connexes de la même époque [183, 169, 23] ne la précisent pas ou font référence à [17]. Une autre heuristique a plus tard été présentée dans [87] : elle conduit à la même relation.

Aussi, présentons-nous la dérivation de la condition détaillée par Brackbill *et al.*, puis celle de Kang *et al.*, de manière à resituer la problématique qui fédère ce chapitre.

La condition de stabilité de Brackbill, Kothe et Zemach [17]

Ils demandent, pour que le schéma soit stable, que le pas de temps, associé à la tension de

surface et noté Δt_s, contienne les ondes capillaires, *i.e.*

$$\frac{c_\sigma \Delta t_s}{\Delta x} < \frac{1}{2} \tag{6.1}$$

où c_σ est la vitesse de phase de l'onde capillaire se propageant sur l'interface. Pour avoir une estimation de cette vitesse, ils invoquent un ouvrage d'Elmore et Heald [44] dont ils s'inspirent en proposant la relation :

$$c_\sigma = \sqrt{\frac{\sigma k}{\rho_1 + \rho_2}} \tag{6.2}$$

où σ est le coefficient de tension de surface, k est le nombre d'onde et les ρ_i sont les densités des deux fluides. Le facteur 1/2 (plutôt que 1) dans (6.1) permet de gérer le cas où deux ondes capillaires convergentes entreraient dans une cellule du maillage, par deux faces opposées. Le pas de temps garantissant la stabilité s'obtient en injectant la vitesse de phase maximale. Grâce à (6.2), $\max_k c_\sigma(k)$ est atteint pour le nombre d'onde $k_{max} = \pi \,/\, \Delta x$, correspondant à la longueur d'onde minimale $2\,\Delta x$ que peut capter le maillage. En substituant alors (6.2) dans (6.1) avec $k = k_{max}$, il vient :

$$\Delta t_s < \sqrt{\frac{\hat{\rho}\,(\Delta x)^3}{2\pi\sigma}} \tag{6.3}$$

où $\hat{\rho} = (\rho_1 + \rho_2)/2$. C'est cette relation (6.3) qui est à l'origine de la majeure partie des conditions de stabilité, induites par la tension de surface, utilisées par les codes actuels.

L'heuristique de Kang, Fedkiw et Liu [87]

Ils utilisent l'analyse empirique qui consiste à affirmer que la restriction sur le pas de temps, due à la condition de stabilité, peut s'exprimer sous la forme d'une relation de type CFL :

$$\frac{v_{st}\ \Delta t^{(st)}}{\Delta x} \leq 1 \tag{6.4}$$

où la vitesse capillaire v_{st} se déduit de l'accélération capillaire

$$\frac{\delta\,\sigma\,\kappa}{\rho} \tag{6.5}$$

induite par la courbure κ. D'un point de vue discret, on peut estimer le Dirac sur l'interface par $(\Delta x)^{-1}$; de plus, la courbure maximale qu'une grille peut capter est elle aussi $(\Delta x)^{-1}$. Par conséquent, on a

$$v_{st} = \frac{\sigma}{\Delta x^2\,\rho}\ \Delta t^{(st)} \tag{6.6}$$

On peut finalement en déduire l'estimation du pas de temps numérique qui vérifie la condition de stabilité induite par la tension de surface :

$$\Delta t^{(st)} = \sqrt{\frac{\rho}{\sigma}}\ \Delta x^{\frac{3}{2}} \tag{6.7}$$

Il convient de remarquer que (6.7) vient formellement d'un équilibre entre le terme instationnaire et la tension de surface dans le modèle de Navier-Stokes. Cette estimation de la vitesse capillaire n'a donc pas lieu d'être lorsque l'on s'intéresse à des déplacements d'interface dont la forme est quasi stationnaire.

Dans la prochaine section, nous proposons une dérivation qui conduit à une autre condition, en faisant l'hypothèse que l'écoulement présente un nombre de Reynolds faible à modéré, où des interfaces peuvent atteindre une forme stationnaire durant leur déplacement.

6.2 Dérivation d'une condition

Proposition 6.2.1 *Supposons que la discrétisation en temps de (5.11) (5.6) traite le terme de tension de surface de manière explicite et que (5.7) soit discrétisé à l'aide d'un schéma explicite stable. Alors, quelque soit la discrétisation en espace, un schéma numérique associé à une telle discrétisation en temps du problème (5.11) (5.6) (5.7) est stable sous la condition*

$$\Delta t \leq min\left(\Delta t_c, \Delta t_\sigma\right), \text{ avec } \Delta t_c = c_1 \|\mathbf{u}\|^{-1}_{L^\infty(\Omega)} \Delta x \text{ et } \Delta t_\sigma = c_2 \frac{\eta}{\sigma} \Delta x \tag{6.8}$$

où Δt est le pas de discrétisation en temps, Δx, le pas en espace et c_1, c_2 ne dépendent pas des données discrètes du problème.

Nous notons bien que la dérivation qui va suivre n'est pas, *stricto sensu*, une preuve mathématique puisque des hypothèses physiques pertinentes – relatives aux solutions de Navier-Stokes – sont introduites pas à pas dans la démonstration. En fait, ces hypothèses permettent de conclure l'analyse de l'estimation en vitesse et par suite sont utiles pour l'analyse numérique de la contrainte sur le pas de temps. Il est probable que la démonstration rigoureuse de nos hypothèses ne soit pas triviale, du fait du caractère hautement non-linéaire exhibé par le modèle de Navier-Stokes avec tension de surface. La dérivation proposée reste donc heuristique mais tente de donner une analyse aussi complète que possible et apporte une nouvelle vision des perturbations capillaires dans le contexte où elles sont réellement prépondérantes. Par ailleurs, le résultat de la proposition a des implications touchant une gamme importante de régimes d'écoulements bifluides.

Preuve
Tout d'abord, les termes convectifs induisent la première contrainte $\Delta t \leq c_1 \|\mathbf{u}\|^{-1}_{L^\infty(\Omega)} \Delta x$ qui est la contrainte CFL classique. La constante c_1 dépend du schéma utilisé pour discrétiser l'équation de transport (5.7).

Ensuite, la condition $\Delta t \leq \Delta t_\sigma$ permet de supprimer les phénomènes d'oscillation de l'interface dûs à l'influence de la tension de surface. L'analyse de ce phénomène constitue l'essentiel de la dérivation. Nous allons effectuer l'étude sur le problème continu au lieu de considérer le problème discret. Pour cela, on suppose que le schéma numérique approche le problème continu de manière consistante. L'estimation de la vitesse induite par une perturbation de l'interface est le point clé de l'analyse.

On considère une interface régulière $\Gamma_0(t)$, à l'instant t, et on suppose qu'elle peut être paramétrisée par :

$$\Gamma_0(t) = \{(x_{\Gamma_0}(s); y_{\Gamma_0}(s)) \in \mathbb{R}^2 / s \in [-1; 1)\} \tag{6.9}$$

Soit, par ailleurs, une fonction f de classe C^2 dont le support $supp(f) \subset [-1; 1]$, telle que $\|f\|_{C^0} = 1$ et $\|f\|_{C^2} = O(1)$. On considère alors la perturbation de $\Gamma_0(t)$ suivante :

$$\Gamma(t) = \left\{ \left(x_{\Gamma_0}(s); y_{\Gamma_0}(s) + \delta f\left(\frac{s}{L}\right)\right) \in \mathbb{R}^2 / s \in [-1; 1) \right\} \tag{6.10}$$

où δ et L sont respectivement l'amplitude et la longueur d'onde d'une petite perturbation. Nous verrons que nous sommes en fait plutôt concernés par des faibles longueurs d'onde L,

qui génèrent de fortes variations de la courbure et, par suite, de fortes vitesses. La contrainte sur le pas de temps doit permettre au schéma numérique de prévoir une interface $\Gamma(t+\Delta t)$ dont la perturbation est plus faible que celle de $\Gamma(t)$. Remarquons que l'on peut mener la même analyse en considérant une perturbation de la vitesse à la place d'une perturbation de l'interface.

Rappelons que, dans un contexte *Level Set*, la fonction de Dirac portée par la normale à l'interface est remplacée par son avatar lissé, grâce à la fonction de Heaviside lissée H_ε qui tend vers H lorsque ε tend vers zéro. En particulier,

$$supp\left(H'_\varepsilon\right) \subset (-\varepsilon;\varepsilon) \tag{6.11}$$

$$\|H'_\varepsilon\|_\infty \leq \frac{2}{\varepsilon} \tag{6.12}$$

Soit, de plus, $\kappa_0(x,y)$ (resp. $\kappa(x,y)$), la courbure de Γ_0 (resp. Γ) au point $(x,y) \in \mathbb{R}^2$. Ces deux courbures sont utiles dans un $\varepsilon-$voisinage de Γ_0 et Γ, lorsque la fonction de Dirac à l'interface est $\varepsilon-$régularisée. Cependant, afin de simplifier l'analyse et d'estimer le terme source, les courbures sont étendues sur tout le domaine de telle manière que

$$\|\nabla\kappa_0\|_{L^\infty(\Omega)} = \|\partial_s\kappa_0\|_{L^\infty(\Gamma_0)} \tag{6.13}$$

$$\|\nabla\kappa\|_{L^\infty(\Omega)} = \|\partial_s\kappa\|_{L^\infty(\Gamma)} \tag{6.14}$$

où ∂_s est la dérivée tangentielle le long de Γ ou Γ_0.

On introduit alors $\mathbf{u}$ le champ de vitesse associé à l'interface Γ_0 et vérifiant

$$\left\{\begin{array}{l} \rho(\partial_t\mathbf{u} + \mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}) - div(2\eta D\mathbf{u}) + \nabla p_0 = -\sigma\nabla\kappa_0 H_\varepsilon(\phi_0) \\ div(\mathbf{u}) = 0 \end{array}\right. \tag{6.15}$$

ainsi que $\mathbf{v}$ celui associé à l'interface Γ et vérifiant

$$\left\{\begin{array}{l} \rho(\partial_t\mathbf{v} + \mathbf{v}.\nabla\mathbf{v}) - div(2\eta D\mathbf{v}) + \nabla p = -\sigma\nabla\kappa H_\varepsilon(\phi) \\ div(\mathbf{v}) = 0 \end{array}\right. \tag{6.16}$$

Notons, qu'un relèvement en pression classique permet d'écrire une telle formulation du terme de tension de surface, puisque

$$\kappa\nabla H_\varepsilon(\phi) = \nabla(\kappa H_\varepsilon(\phi)) - \nabla\kappa H_\varepsilon(\phi). \tag{6.17}$$

On définit alors $\mathbf{w} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$, la perturbation de vitesse qui vérifie l'équation induite par la différence (6.16)-(6.15). En supposant que ρ et η sont constantes et en notant $q = p - p_0$, il vient :

$$div(\mathbf{w}) = 0 \tag{6.18}$$

$$\begin{array}{r} \rho\partial_t\mathbf{w} - div(2\eta D\mathbf{w}) + \rho\mathbf{v}.\nabla\mathbf{w} + \rho\mathbf{w}.\nabla\mathbf{u} + \nabla q = \\ -\sigma\nabla(\kappa-\kappa_0)H_\varepsilon(\phi) - \sigma\nabla\kappa_0(H_\varepsilon(\phi) - H_\varepsilon(\phi_0)) \end{array} \tag{6.19}$$

On constate rapidement que les deux termes du second membre peuvent être respectivement estimés par :

$$\|\nabla(\kappa-\kappa_0)H_\varepsilon(\phi)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq c\frac{\delta}{L^3} \tag{6.20}$$

$$\|\nabla\kappa_0(H_\varepsilon(\phi)-H_\varepsilon(\phi_0))\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \|\partial_s\kappa_0\|_{L^\infty(\Gamma_0)}\frac{c\delta}{\varepsilon} \tag{6.21}$$

La première estimation provient de considérations géométriques sur le terme de courbure pour des perturbations caractérisées par (6.10). La seconde est une conséquence directe de la forme du Heaviside lissé.

On en déduit que le terme source de (6.19), que l'on notera g dans la suite, est donc contrôlé à l'instant $t=0$, en norme $L^\infty(\mathbb{R}^2)$ par :

$$\|g(0)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq c\sigma\left(\frac{\delta}{L^3} \quad + \quad \|\partial_s\kappa_0\|_{L^\infty(\Gamma_0)}\frac{\delta}{\varepsilon}\right) \tag{6.22}$$

où c ne dépend pas de δ, L, ε et σ. Nous sommes bien conscients que l'estimation qui met en jeu ε n'est pas optimale quand ce paramètre tend vers zéro ; cependant, nous verrons qu'elle est suffisante pour l'analyse lorsque que l'on se place dans la gamme $\varepsilon \sim \Delta x$. Une estimation d'énergie L^2 classique de (6.19) donne :

$$\frac{\rho}{2}\frac{d}{dt}\|\mathbf{w}\|^2_{L^2(\Omega)} + \eta\|\nabla\mathbf{w}\|^2_{L^2(\Omega)} \leq \|g\|_{L^2(\Omega)}\|\mathbf{w}\|_{L^2(\Omega)} + \rho\|\nabla\mathbf{u}\|_{L^\infty(\Omega)}\|\mathbf{w}\|^2_{L^2(\Omega)} \tag{6.23}$$

Il convient maintenant d'introduire l'hypothèse suivante, qui se révèle être vérifiée numériquement :

$$\|\nabla\mathbf{w}\|_{L^2(\Omega)} \sim \frac{1}{L}\|\mathbf{w}\|_{L^2(\Omega)} \tag{6.24}$$

i.e. le terme source considéré génère une perturbation en vitesse qui exhibe essentiellement la même fréquence L. Par conséquent, il existe une constante C telle que

$$\frac{\rho}{2}\frac{d}{dt}\|\mathbf{w}\|^2_{L^2(\Omega)} + \left(\frac{C\eta}{L^2} - \rho\|\nabla\mathbf{u}\|_{L^\infty(\Omega)}\right)\|\mathbf{w}\|^2_{L^2(\Omega)} \leq \frac{L^2}{C\eta}\|g\|^2_{L^2(\Omega)} \tag{6.25}$$

et, si

$$\rho\|\nabla\mathbf{u}\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \frac{C\eta}{2L^2}, \tag{6.26}$$

ce qui est le cas lorsque l'écoulement est modéré et la longueur d'onde L est suffisamment faible, on obtient :

$$\begin{aligned}\|\mathbf{w}(t)\|^2_{L^2(\Omega)} \quad &\leq \quad \|\mathbf{w}(0)\|^2_{L^2(\Omega)}\exp\left(-\frac{C\eta}{\rho L^2}t\right) \\ &\quad + \left(1-\exp\left(-\frac{C\eta}{\rho L^2}t\right)\right)\frac{L^4}{C^2\eta^2}\sup_{s\in(0,t)}\|g(s)\|^2_{L^2(\Omega)}.\end{aligned} \tag{6.27}$$

Si l'on considère que le champ de vitesse initial n'est pas perturbé, $\mathbf{w}(0)=0$ et le terme source g est maximal pour $t=0$, donc finalement

$$\|\mathbf{w}(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \frac{L^2}{C\eta}\|g(0)\|_{L^2(\Omega)}, \quad \forall t>0. \tag{6.28}$$

En invoquant de nouveau l'hypothèse en fréquence (de même que pour la relation (6.24)), on a pour la perturbation en vitesse et le second membre

$$\begin{aligned}\|\mathbf{w}\|_{L^2(\Omega)} &\sim L' \|\mathbf{w}\|_{L^\infty(\Omega)} \\ \|g\|_{L^2(\Omega)} &\sim L' \|g\|_{L^\infty(\Omega)}\end{aligned} \tag{6.29}$$

La même constante L' de part et d'autre de l'inégalité (6.28), lors du passage de la norme $\|.\|_{L^2(\Omega)}$ à la norme $\|.\|_{L^\infty(\Omega)}$, permet d'écrire :

$$\|\mathbf{w}(t)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \frac{L^2}{C\eta}\|g(0)\|_{L^\infty(\Omega)}, \quad \forall t>0. \tag{6.30}$$

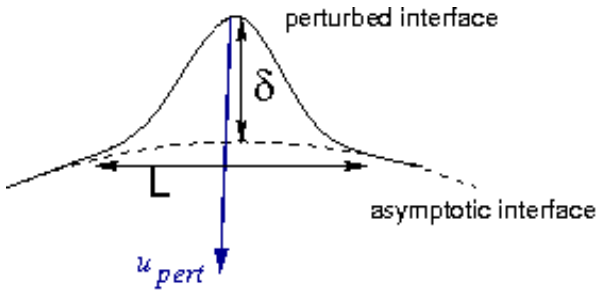


FIG. 6.1 – Une interface perturbée et la vitesse induite

Une discrétisation explicite du terme source implique de prendre un pas de temps suffisamment faible de manière à ce que le déplacement de l'interface (durant un pas de temps) soit plus faible que la taille δ de la perturbation de l'interface. En effet, si ce déplacement dépasse 2δ, la perturbation va être amplifiée et osciller autour de l'interface. Par conséquent, la condition de stabilité consiste à supprimer ce type d'oscillations en imposant (voir Figure 6.1)

$$\Delta t_\sigma = \frac{\delta}{\|\mathbf{w}\|_{L^\infty(\Omega)}} \leq c\frac{\eta}{\sigma}\frac{L}{1+\|\partial_s\kappa_0\|_{L^\infty(\Gamma_0)}\frac{L^3}{\varepsilon}}. \tag{6.31}$$

Comme la longueur d'onde L est bornée supérieurement, cette condition est la plus restrictive pour les longueurs d'onde les plus faibles. Mais d'un point de vue discret, la plus petite valeur de L que l'on peut capter est celle induite par le pas d'espace. Si bien qu'avec $L \sim \Delta x$, (6.31) donne

$$\Delta t_\sigma \sim \frac{\eta}{\sigma}\Delta x \tag{6.32}$$

et clôt la preuve dans le cas où on a considéré que le champ de vitesse initial n'était pas perturbé.

Si on suppose maintenant que la perturbation a lieu sur le champ de vitesse initial (avec une longueur d'onde L) et non sur l'interface alors $\mathbf{w}(0) \neq 0$ et la déformation de l'interface exhibera la même longueur d'onde, du fait de l'inertie, à un instant ultérieur. On peut donc conduire la même analyse en partant de (6.27). Il existe alors un temps positif en lequel la valeur maximale de g sera atteinte, correspondant à la valeur maximale de l'amplitude de la déformation de l'interface. Grâce à (6.27), il apparaît que la donnée initiale subit une évanescence exponentielle ; le terme source va croître à cause de la perturbation en vitesse et sa génération a lieu avant que cette perturbation ne soit écrasée par l'exponentielle.

□

Notons enfin, qu'avec un modèle de Stokes, la dérivation est plus simple et conduit à la même condition de stabilité.

Confirmation numérique de la condition de stabilité

Dans les applications pratiques, il faut déterminer la constante c_2. En utilisant un code résolvant le modèle de Stokes pour des applications en microfluidique, des tests numériques

ont, par exemple, montré que $c_2 = 8$ est une valeur seuil pour laquelle les calculs d'évolution sont stables (*cf.* Figure 6.2). Pour des valeurs plus fortes, les oscillations sont amplifiées et le calcul devient instable (*cf.* Figure 6.3). De plus, cette valeur est relativement invariante lorsque l'on raffine le maillage (entre 6 et 8). Ces expériences numériques traduisent bien le fait que c_2 est indépendante du pas d'espace Δx.

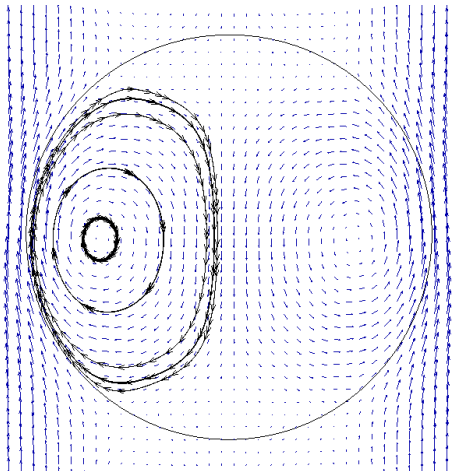


FIG. 6.2 – Champ de vitesse (en bleu) dans le référentiel de la goutte pour $c_2 = 8$, quelques lignes de courants (en lignes fléchées) et interface (en noir) : le calcul est stable.

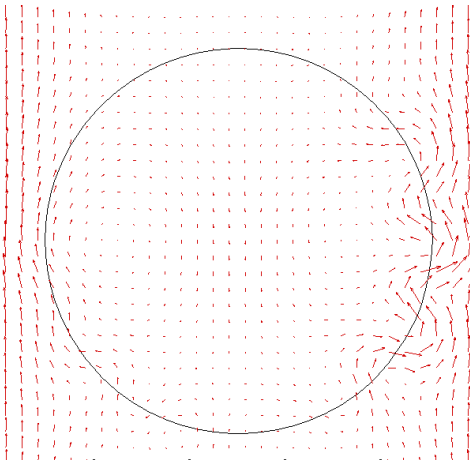


FIG. 6.3 – Champ de vitesse (en rouge) dans le référentiel de la goutte pour $c_2 = 9$ et interface (en noir) : le calcul est instable.

Remarque 6.1

A titre illustratif, nous présentons le problème induit par la seule utilisation de la condition CFL. Pour cela, on considère une interface initiale qui a la forme d'une ellipse (courbe verte sur la Figure 6.4). Elle est soumise à un écoulement dirigé vers le bas de la figure et la force de tension de surface est prépondérante. On distingue les interfaces (en noir) aux temps

$5\Delta t$, $10\Delta t$, $15\Delta t$ et $20\Delta t$: la goutte atteint donc rapidement une forme quasi-circulaire – sous l'action de la tension de surface – mais reste ensuite immobile dans le canal (au sens où, même si la forme de l'interface est modifiée, le barycentre de la goutte est pratiquement immobile). Ceci est problématique puisque un calcul correct devrait exhiber une goutte qui se translate sous l'action de l'injection. En fait, les champ de vitesse associés à ces interfaces oscillantes autour d'une position d'équilibre présentent des vitesses, au niveau de l'interface, significativement plus fortes (en norme) que la vitesse d'injection.

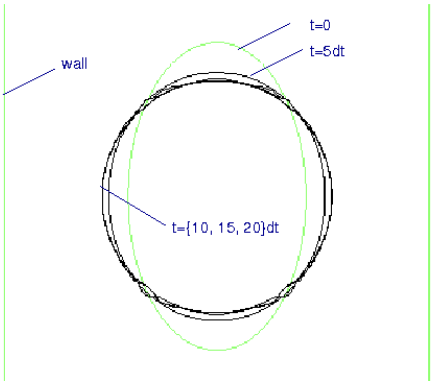


FIG. 6.4 – Un problème de stabilité numérique : une interface initiale (ellipse verte) évolue sous l'influence de l'injection et la tension de surface est prépondérante. En noir sont données les interfaces aux temps $5\Delta t$, $10\Delta t$, $15\Delta t$ et $20\Delta t$. Les lignes verticales vertes sont les parois du canal.

L'explication de ce phénomène est illustrée sur la Figure 6.5 et est à relier à la dérivation précédente (*cf.* Figure 6.1) : comme la contrainte de stabilité n'est ici donnée que par la condition CFL, l'interface se déplace d'une distance Δx en un temps $\Delta t_c = \Delta x / \max(u)$. Cependant, le pas de temps ainsi déterminé induit des déplacements de l'interface conduisant à une amplification des ondes capillaires et donc à des vitesses très fortes au niveau de l'interface car générées par des courbures élevées (associées à ces interfaces perturbées). Par suite :

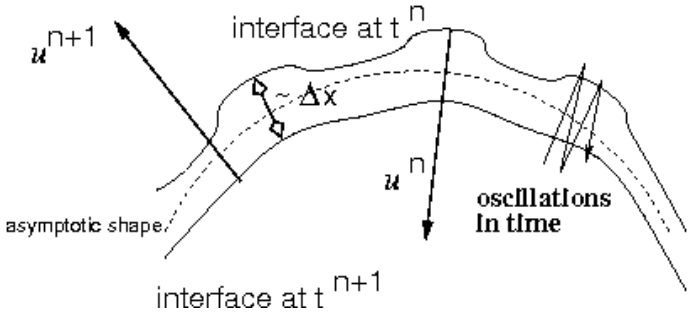


FIG. 6.5 – L'utilisation de la seule contrainte CFL, alors que la dynamique est pilotée par la tension de surface, induit des oscillations de l'interface autour d'une position "asymptotique", conduisant à l'immobilité de la goutte.

- l'interface ne se stabilise pas, car à chaque itération, elle se déplace de Δx en traversant la position asymptotique ;
- l'interface est globalement "stationnaire" car elle oscille autour de cette position avec des pas de temps très faibles.

L'utilisation de la condition (6.32) permet de lever ce problème.

6.3 Discussion

Comme on peut le constater, la condition de stabilité induite par la tension de surface que nous avons dérivée est différente de celle proposée par Brackbill *et al.*. La dérivation de (6.3) met exclusivement l'accent sur les termes liés à la densité dans les équations de Navier-Stokes (*i.e.* les termes instationnaire et d'inertie). En effet, la viscosité n'apparaît pas comme un paramètre de cette condition. Pour des écoulements où le nombre de Reynolds est faible à modéré – des interfaces dont la forme est stationnaire peuvent donc être présentes dans l'écoulement – notre condition de stabilité (6.32) met en jeu la viscosité, soulignant l'importance des termes visqueux pour ce type d'écoulement. De plus, si l'on ne considère que la dépendance vis-à-vis du pas d'espace, (6.32) constitue une sorte de relaxation de (6.3) puisque l'exposant est 1 au lieu de 3/2. Bien sûr, si les densités sont élevées et les viscosités faibles, notre condition peut être plus restrictive que (6.3).

Par ailleurs, si le nombre de Reynolds est trop fort, les effets d'inertie vont se renforcer et les interfaces n'auront plus une forme stationnaire ; par conséquent, (6.32) n'a donc plus de raison d'être valide et on peut utiliser la condition (6.3). En revanche, lorsque les formes d'interface sont stabilisées, l'heuristique impliquant les effets d'inertie est mise en défaut : la dynamique résulte de la compétition entre les effets visqueux et capillaires. Il faut donc adopter l'approche conduisant à notre condition de stabilité.

Ensuite, même si la dépendance en Δx est relaxée, notre condition de stabilité peut devenir particulièrement restrictive dans certaines applications à cause de $\frac{\eta}{\sigma}$. Comme le mentionnent Brackbill *et al.* [17], un traitement implicite de la tension de surface permettrait de supprimer cette contrainte. Cependant, du fait du couplage fortement non linéaire induit par ϕ dans (5.11)-(5.6)-(5.7), impliciter ce terme source n'est pas une tâche triviale. Une avancée dans cette direction a notamment été réalisée par Hysing dans [78] où il propose une discrétisation semi-implicite du terme de tension de surface.

Un autre intérêt de la dérivation est qu'elle montre que si la courbure est régularisée (par exemple, grâce à une procédure d'interpolation de l'interface qui est réalisée par plusieurs méthodes, pour la reconstruire, comme évoqué au chapitre 1) alors le pas de temps capillaire Δt_σ augmente. En effet, les perturbations de l'interface de longueur d'onde L et d'amplitude δ sont modifiées par la régularisation qui conduit à des L supérieurs et des δ plus faibles. D'après la preuve de la Proposition 6.2.1, on en déduit que la vitesse perturbée est plus faible. Par conséquent, cela induit une relaxation de la contrainte sur le pas de temps. Plus précisément, d'après nos estimations, la norme w de la vitesse perturbée est telle que :

$$w \sim \frac{\sigma}{\eta}\frac{\delta}{L} \tag{6.33}$$

ce qui donne un pas de temps :

$$\Delta t_\sigma \sim \frac{\eta}{\sigma} L. \tag{6.34}$$

Mais si les calculs de courbure sont réalisés sur une interface "lissée", les perturbations (de longueur d'onde $L^\star$ et d'amplitude $\delta^\star$) qui vont servir à déterminer la condition de stabilité sont telles que :

$$L^\star > L \ \text{ et } \delta^\star < \delta, \tag{6.35}$$

par conséquent :

$$\frac{\eta}{\sigma}\frac{\delta}{\delta^\star} L^\star \sim \Delta t_\sigma^\star > \Delta t_\sigma. \tag{6.36}$$

Ceci est bien la traduction que le pas de temps $\Delta t_\sigma^\star$, induit par la régularisation, est moins contraignant que celui issu de la perturbation de l'interface originale.

Ce dernier point étant mis en perspective, les courants parasites peuvent aussi être considérés comme une conséquence de la transgression de la condition de stabilité.
Rappelons tout d'abord que l'idée du modèle CSF [17] consiste à traiter le terme de tension de surface comme une force volumique dans les équations de la conservation de la quantité de mouvement. Cette force est distribuée dans une zone de transition, permet une implémentation directe des effets capillaires (quelque soit la dimension de l'espace) et gère facilement les changements topologiques. Cependant, l'un des défauts de cette méthode est qu'elle peut générer des *courants parasites* au voisinage de l'interface. Il s'agit de vitesses erratiques non physiques qui peuvent induire une instabilité de l'interface. D'abord observés lors de l'utilisation de méthodes de type Boltzmann, les courants parasites furent ensuite présentés par Lafaurie *et al.* dans [92], où ils introduisirent d'ailleurs une méthode alternative à l'approche CSF : la méthode *Continuum Surface Stress* (CSS). Ensuite, toute une série de travaux fut mise en oeuvre pour lever cette difficulté [133, 122, 177, 129, 147, 175, 101]. Les idées clés proposées pour supprimer les courants parasites sont essentiellement :

1. l'amélioration du calcul de la courbure ;
2. la construction de schémas numériques qui réalisent un équilibre, au niveau discret, entre la tension de surface et le gradient de pression ;
3. ainsi que, comme le propose [99], des schémas d'intégration en temps adaptatifs pour mieux capter la raideur du problème numérique induite par la tension de surface.

Par ailleurs, il convient de mentionner aussi un travail singulier et prometteur développé par Jamet *et al.* [82] qui base l'analyse sur une minimisation d'énergie et permet de réduire les courants parasites à la précision machine. Remarquons que cette approche est appliquée avec des interfaces diffuses et la méthode du second gradient (évoquées au chapitre 1).
Si l'on revient au problème central de ce chapitre, on a vu sur la Figure 6.3 que, si la condition de stabilité n'est pas respectée, des courants que l'on peut qualifier de "parasites" se développent. De plus, si dans la même simulation, on calcule la courbure sur une interface régularisée, on observera des courants parasites de plus faible amplitude, même si la condition de stabilité n'est toujours pas vérifiée. Ces courants peuvent même disparaître si la condition de stabilité est satisfaite, grâce à un lissage performant de l'interface qui va fortement relaxer le pas de temps déterminé par (6.32). Plus précisément, supposons que dans un code, le pas de temps numérique utilisé Δt_{num} ne vérifie pas la condition de stabilité, on a alors :

$$\Delta t_\sigma < \Delta t_{num} \tag{6.37}$$

donc, a priori, des courants parasites vont être générés. Mais si on suppose de plus que la courbure est calculée grâce à une interpolation efficace de l'interface, qui "gomme" parfaitement les hautes fréquences, alors la condition induite par (6.32) va donner un autre temps capillaire $\Delta t'_\sigma$ tel que :

$$\Delta t_{num} < \Delta t'_\sigma \tag{6.38}$$

Si bien que, grâce à ce lissage, le code ne verra pas que la condition est transgressée et il n'y aura pas de courant parasite.

Cependant, de telles instabilités ne doivent pas êtres confondues avec une erreur numérique de consistance, qui va décroître en même temps que le pas de discrétisation Δx. Par exemple, si l'on considère le problème de Laplace avec une interface statique circulaire en 2D (ou sphérique en 3D), les vitesses non nulles (donc non physiques) près de l'interface diminuent avec

Δx mais ne convergent pas vers le zéro-machine si la courbure discrète ne converge pas vers la valeur constante induite par la forme circulaire. En revanche, si l'on donne artificiellement un calcul parfait de la courbure du cercle alors notre solveur basé sur la méthode du Lagrangien Augmenté détermine un champ de vitesse nul, à la précision machine. On illustre ainsi bien, qu'un calcul précis de la courbure est un point crucial pour obtenir une convergence en vitesse précise, relativement à un raffinement du maillage. Ceci est d'ailleurs largement mentionné dans la littérature [122, 147, 50, 101].

Finalement, si l'on considère des applications en microfluidique où $\eta \sim 10^{-3}$ - 10^{-2} $kg/(ms)$ et $\sigma \sim 10^{-3}$ - 10^{-2} N/m. A l'entrée, la vitesse d'injection $u_{in} \sim 10^{-2}$ m/s. Par conséquent :

$$\Delta t_c = \frac{\Delta x}{u_{in}} = 100\Delta x \quad \text{et} \quad \Delta t_\sigma = \frac{\eta}{\sigma}\,\Delta x = \Delta x \tag{6.39}$$

On voit donc que, pour de telles applications, le pas de temps de la condition CFL est beaucoup plus grand que celui induit par la tension de surface. Si bien que le pas de temps global $\Delta t = min\,(\Delta t_c, \Delta t_\sigma)$ est drastiquement contraint et par suite, le coût de calcul est prohibitif.

6.4 Une méthode de splitting

Anticipant un peu sur le prochain chapitre, il convient d'ajouter qu'en microfluidique, du fait de la prépondérance de la tension de surface, les interfaces convergent très rapidement vers une forme stationnaire, lorsque le canal, au travers duquel elles se meuvent, est droit. Dans cette section, nous décrivons une méthode de numérique qui exploite ce caractère stationnaire de la forme des interfaces et permet de diminuer les temps de calcul. Nous avons utilisé cette approche avec succés pour étudier la dynamique au sein de gouttes qui évoluent dans un microcanal. Pour de telles applications, il apparaît que la vitesse dans le référentiel de la goutte est tangente à l'interface lorsque sa forme est invariante. Par conséquent, une faible vitesse normale est un critère pour caractériser une forme asymptotique stabilisée. On en déduit que dans un microcanal droit, l'écoulement global peut se décomposer à l'aide de la vitesse dans le référentiel de la goutte *et* d'une vitesse de translation constante caractérisant l'avancée de la goutte.

6.4.1 Détermination de la vitesse scalaire de la goutte

Pour travailler dans le référentiel de la goutte, il nous faut donc déterminer la vitesse scalaire de translation de la goutte. Cette vitesse a un sens dès que la forme de la goutte est stabilisée, en ce cas, il existe un scalaire u_d tel que :

$$\mathbf{u} = u_d\mathbf{U} + \mathbf{v},\ \ \mathbf{v}\cdot\mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_0, \tag{6.40}$$

où $\mathbf{U}$ est un vecteur vitesse unitaire parallèle à la paroi dans un canal régulier (*i.e.* à section constante dans l'axe longitudinal de propagation). Ainsi qu'évoqué précédemment, la goutte se déplace avec la vitesse de translation $u_d\mathbf{U}$ (sous l'action du forçage de l'injection) et la vitesse dans le référentiel de la goutte est $\mathbf{v}$.

Dans le cas général, que la goutte soit stabilisée ou non, on définit la *vitesse locale de la goutte* u_d^{loc}, sur l'interface fluide où $\mathbf{U}\cdot\mathbf{n} \neq 0$, grâce à la relation :

$$u_d^{loc} = \frac{\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}}{\mathbf{U}\cdot\mathbf{n}} \text{ sur } \Gamma_0. \tag{6.41}$$

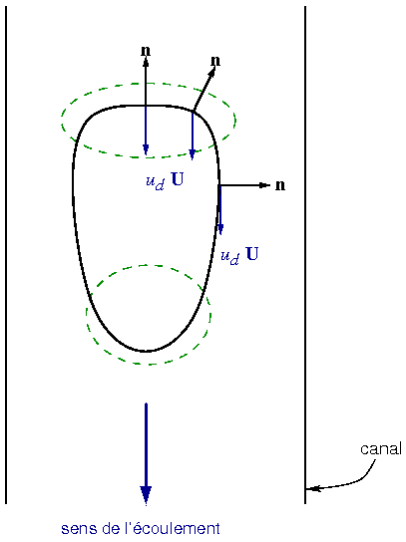


FIG. 6.6 – Détermination de la vitesse de translation de la goutte (en trait noir, au centre du canal) : les flèches noires représentent la normale à l'interface ; les flèches bleues indiquent le vecteur $u_d\mathbf{U}$ constant (en différents endroits de l'interface) ; enfin, les parties de l'interface comprises dans les zones vertes en pointillés schématisent l'ensemble des points utilisés pour calculer la moyenne qui donne u_d.

On définit alors la *vitesse de la goutte* u_d, comme étant la moyenne de ces *vitesses locales*, aux points où $\mathbf{U}\cdot\mathbf{n}$ n'est pas trop faible (il s'agit des zones vertes en pointillés sur la Figure 6.6). Quand toutes les vitesses locales ont convergé vers une valeur commune le long de Γ_0, la vitesse normale globale, $\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}$, vérifie, en vertu de la définition (6.41),

$$\mathbf{u}\cdot\mathbf{n} = u_d\mathbf{U}\cdot\mathbf{n} \text{ sur } \Gamma_0. \tag{6.42}$$

Par suite, la définition (6.40) est vérifiée et en particulier,

$$\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} = 0 \text{ on } \Gamma_0. \tag{6.43}$$

On est donc en présence d'une interface Γ_0 qui a convergé vers sa forme asymptotique et se déplace à vitesse u_d dans la direction du canal. Les critères pour déterminer si la forme de l'interface est stationnaire sont :

- la petitesse de la quantité $\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}$
- ou, de manière équivalente, l'uniformité des vitesses locales, au sens de (6.41).

Dans notre code, on utilise ce dernier critère, comme nous allons le voir à la section suivante.

6.4.2 Décomposition de l'écoulement

La détermination de u_d est profitable à deux titres. D'une part, connaître u_d permet de représenter graphiquement (avec un logiciel de post-traitement) la vitesse dans le référentiel de la goutte $\mathbf{v}$ et ainsi d'analyser la dynamique de mélange en son sein. D'autre part, cela permet de réaliser une décomposition de l'écoulement qui va permettre de diminuer le temps de calcul lorsque le pas de temps capillaire Δt_σ est faible comparativement à Δt_c, le pas de temps associé aux termes convectifs. Avant d'expliquer l'intérêt de ce splitting, nous allons donner l'esquisse de l'algorithme.

Tout d'abord, on calcule le champ de vitesse global $\mathbf{u}$ (solution, par exemple, du problème de Navier-Stokes) et on en déduit un pas de temps convectif global Δt_c grâce à la condition CFL. Puis, en suivant la relation (6.40), on décompose l'écoulement *via* :

$$\mathbf{u} = u_d \mathbf{U} + \mathbf{v}.$$

La première étape du splitting consiste à transporter le fluide sous l'action du champ de vitesse $\mathbf{v}$ à l'aide du pas de temps Δt_σ, ce au cours d'un processus itératif permettant d'atteindre, avec un multiple *ad hoc* de Δt_σ, la durée Δt_c. Cette partie de l'algorithme correspond à une étape où la forme de l'interface se voit modifiée sous l'action de la tension de surface ; au cours de ce processus itératif, on utilise la condition de stabilité restrictive (6.32).
La seconde étape du splitting permet de transporter l'interface, en considérant qu'il s'est écoulé le même temps que dans la première étape, à savoir Δt_c. Pour cela, on utilise la vitesse $\overline{u}_d \mathbf{U}$, où $\overline{u}_d$ correspond à la valeur moyenne des u_d calculées durant le processus itératif. Cette deuxième partie de la décomposition conduit à la translation de la goutte et s'effectue en respectant la condition CFL classique pour l'équation de transport.

La première étape de l'algorithme exhibe un temps de calcul coûteux sauf quand la vitesse $\mathbf{v}$ vérifie $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur l'interface. Dans ce cas, l'équation de transport ne modifie pas la forme de l'interface et il n'est pas utile de poursuivre le processus itératif. On exploite ensuite le caractère stationnaire de la forme de l'interface. Le critère $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur l'interface est satisfait lorsque u_d^{loc} est constant sur cette frontière, *i.e.* quand $u_d^{loc}(x) = u_d \quad \forall x \in \Gamma_0$. D'un point de vue de l'implémentation, nous introduisons un test dans notre code de simulation qui permet de mettre un terme aux itérations lorsque

$$|\max|u_d^{loc}| - |u_d|| \leq 5\%. \tag{6.44}$$

Notre méthode de splitting peut être résumée grâce à l'algorithme suivant :

1. $S_{u_d} = 0$
2. **Étape 1 : déformation de l'interface,** itérer (2a) - (2d) tant que le temps Δt_c n'est pas atteint
   (a) Calculer $\mathbf{u}$, puis la vitesse de la goutte u_d et en déduire la vitesse dans le référentiel de la goutte $\mathbf{v}$ par soustraction du champ $u_d \mathbf{U}$ (d'après (6.40)) ;
   (b) Si $|\max|u_d^{loc}| - |u_d|| \leq 5\%$ alors stopper les itérations ;
   (c) Résoudre l'équation de transport associée à $\mathbf{v}$ avec le pas de temps Δt_σ ;
   (d) Sommer u_d durant les itérations : $S_{u_d} = S_{u_d} + u_d$;
3. $S_{u_d} = S_{u_d} + k u_d$, où k est le nombre d'itérations manquantes dans (2) pour atteindre Δt_c, à cause de (2b)
4. $\overline{u}_d = S_{u_d} \frac{\Delta t_\sigma}{\Delta t_c}$.
5. **Étape 2 : déplacement de l'interface,** résoudre l'équation de transport associée à $\overline{u}_d \mathbf{U}$ avec le pas de temps Δt_c ; reboucler en 1. autant de fois que nécessaire, pour atteindre le temps physique désiré.

6.4.3 Avantages et résultats

Lorsque le but des simulations est d'analyser le champ de vitesse dans le référentiel de la goutte pour un canal droit (ce qui arrive fréquemment en microfluidique), il n'est pas nécessaire de suivre le déplacement de la goutte. On peut donc omettre l'étape 2 et, grâce à cela, il est possible d'utiliser des domaines de calcul moins étendus de part et d'autre de la goutte : on diminue ainsi les coûts de calcul. En effet, en travaillant dans le référentiel de la goutte, celle-ci ne se meut plus et sa forme converge vers l'état stationnaire. Notons que calculer cette asymptotique dans un référentiel fixe permet d'obtenir une meilleure convergence de la forme et du champ de vitesse. en particulier, les calculs de viscosité et de courbure convergent bien vers un état stationnaire, asymptotiquement.

La comparaison des temps de calcul entre une méthode standard et notre méthode de splitting est variable selon la longueur du canal. Le gain en temps CPU devient très élevé pour des canaux de longueur égale à un grand nombre de longueur de gouttes et pour des écoulements lents. Plus précisément, le gain théorique est nul tant que la goutte n'a pas atteint sa forme asymptotique, *par contre*, il est d'un facteur $\Delta t_c/\Delta t_\sigma$ au delà, si l'on s'impose de calculer le champ de vitesse global à chaque translation d'une maille de la goutte. En pratique, l'intérêt de la méthode est de n'effectuer que les calculs nécessaires pour l'obtention de la forme de goutte asymptotique. En effet, cette méthode a été développée pour éliminer les contraintes drastiques sur le pas de temps, inutiles lorsque les interfaces de forme stationnaire ne font que se translater dans un canal.

Illustration de l'efficacité du splitting

Les deux figures qui suivent illustrent la précision que l'on peut obtenir avec l'algorithme présenté ci-dessus, allié à la méthode *Level Set* décrite dans la première partie.

Le contexte est le suivant. On considère une goutte initiale de forme elliptique dans un microcanal droit de diamètre $100\mu m$. Sous l'action de la tension de surface, celle-ci va converger vers une goutte quasi-circulaire non confinée se translatant dans le canal (ceci est réalisé en prenant une vitesse d'injection telle que les effets capillaires soient prédominants). Le maillage contient 60 cellules dans la section du canal. De plus, on considère que les deux fluides ont la même viscosité (hypothèse quelque peu artificielle mais qui permet de se focaliser uniquement sur la tension de surface, sans avoir à tenir compte du couplage visqueux).

La Figure 6.7 présente un zoom sur la goutte qui a atteint sa forme stationnaire. Elle a été obtenue en résolvant un modèle de Stokes stationnaire (physiquement légitime dans ce contexte ; remarquons de plus qu'il n'est pas alors nécessaire de préciser les densités). Renotons que cette microgoutte est transportée dans l'écoulement ; il ne s'agit donc pas d'un problème de Laplace statique ; néanmoins, avoir en tête la solution à vitesse nulle permet de commenter la précision des résultats obtenus. Tout d'abord, comme nous l'avons déja dit lors de la présentation des modèles, on constate bien que la tension de surface joue un rôle prépondérant à ces échelles. En effet, même si la forme asymptotique obtenue est très proche d'un cercle (sans en être un, ce qui est normal dans cet écoulement où la goutte est toujours un peu déformée), on observe que le champ de vitesse $\mathbf{u}$ est significativement modifié : si l'interface était circulaire, les lignes de courants devraient être rectilignes (Il en en effet aisé de voir que, dans ce cas, la courbure est constante donc le terme de tension de surface est un pur gradient que l'on peut associer à la pression. Dès lors, un écoulement de Poiseuille

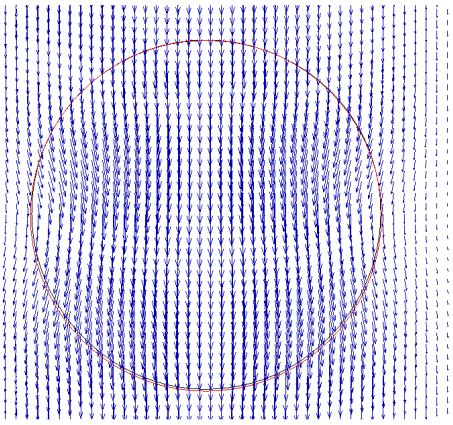


FIG. 6.7 – Zoom sur une goutte non confinée (ligne noire) dans un microcanal et le champ de vitesse global u (flèches bleues) associé, solution d'un problème de Stokes. De plus, on a superposé un cercle parfait pour constater la précision de la méthode (ligne rouge)

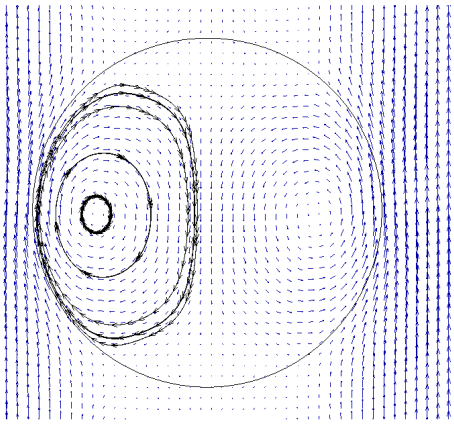


FIG. 6.8 – Même simulation que la Figure 6.7 mais les flèches bleues représentent, ici, le champ de vitesse v dans le référentiel de la goutte. De plus, quelques lignes de courant (en noir avec de fléches) révèlent la dynamique de mélange au sein de la goutte.

est solution des équations de Stokes). La superposition du cercle rouge montre aussi que le code est capable de capter des formes asymptotiques avec une bonne précision puisque le pas d'espace Δx se déduit de l'écart entre deux vecteurs vitesse (bien visible dans la direction horizontale) sur la Figure 6.7. De plus, grâce à (6.41) et (6.44), on dispose d'un critère qui nous permet de quantifier la convergence vers la forme stationnaire et ainsi la qualité des résultats. Ce, comme le montre la Figure 6.7, pour des précisions, en terme de position d'interface, inférieures au pas de discrétisation. Sans clamer des ordres de précision élévés (> 2), on peut tout de même affirmer, au vu de ces résultats, que ces simulations sont consistantes et précises.

Une confirmation est apportée par la Figure 6.8, qui donne, pour la même simulation, le

champ de vitesse $\mathbf{v}$ dans le référentiel de la goutte. On constate bien que le code a été capable de trouver des vitesses correctement tangentes à l'interface, révélatrices de la convergence vers la forme asymptotique. Quelques lignes de courants montrent bien les recirculations au sein de la goutte :

- elles confirment l'absence de composantes normales en vitesse sur l'interface
- et d'un point de vue physique, elles exhibent clairement la dynamique de mélange au sein de la goutte.

A notre connaissance, en microfluidique, ce sont les premiers résultats numériques qui permettent, grâce à des outils dédiés, de capter avec précision l'ensemble des zones de recirculation présentes dans des microgouttes. Nous préciserons cela dans les chapitres qui suivent.

Ainsi, au cours de ce chapitre, nous avons introduit une nouvelle condition de stabilité numérique induite par le terme de tension de surface, lorsque celui-ci est discrétisé de manière explicite dans un modèle de suivi d'interface utilisant une approche découplée relativement à la résolution de l'écoulement et du déplacement du front. Elle fait suite au travail de Brackbill, Kothe et Zemach [17] dont la condition sert toujours de référence aux codes bifluides adoptant ce formalisme (*i.e.* un nombre important de simulateurs). En considérant les effets capillaires sur des interfaces dont la forme est stabilisée au sein d'écoulements à Reynolds modérés, nous apportons un autre éclairage sur le rôle de la tension de surface. De plus, nous avons vu que les courants parasites pouvaient aussi s'interpréter comme une conséquence de la transgression de la condition de stabilité capillaire. Enfin, ayant à l'esprit la simulation d'interfaces en microfluidique, nous avons présenté une méthode de décomposition de l'écoulement qui exploite le caractère stationnaire de la forme des interfaces. Ce splitting permet de capter précisément la forme des gouttes et les champs de vitesse associés ; par ailleurs, il permet aussi de diminuer les temps de calcul lorsque les vitesses sont faibles et que l'on veut simuler l'évolution de trains de gouttes dans un canal droit, sur une longue période temporelle.

Il est maintenant temps de réaliser la synthèse des outils *Level Set* efficaces décrits dans la première partie, des solveurs d'écoulements et des nouveaux développements numériques de ce deuxième mouvement, au terme duquel nous nous sommes déjà glissés dans le thème central de la dernière partie : la simulation de gouttes évoluant dans des microcanaux.

Cette troisième partie sera l'occasion de présenter une autre composante originale de ce manuscrit, à savoir, la mise à jour de différentes dynamiques de mélange au sein de ces microgouttes.

Troisième Partie

Applications à la dynamique de gouttes en microfluidique

Chapitre 7

Microfluidique

De ces soudains changements d'échelle
qui surprennent et rafraîchissent
naît une sorte d'enchantement.

Nicolas Bouvier.

Nous allons maintenant détailler le contexte physique dans lequel s'insèrent les travaux du présent manuscrit, en l'occurrence, la *microfluidique*. Durant la dernière décennie, cette discipline a révolutionné notre capacité à manipuler et contrôler des écoulements dans des canaux de la taille d'un cheveu. Le comportement des fluides, extrêmement influencés par la prépondérance de la tension de surface et des effets visqueux, est utilisé à profit pour des applications allant de la biologie et la médecine à la chimie et la science des matériaux. Après un rapide historique, nous aborderons certaines spécificités physiques de la microfluidique et présenterons les applications typiques que nous voulons simuler dans les prochains chapitres.

7.1 Introduction

La *microfluidique* se définit comme étant l'étude d'écoulements de fluides simples ou complexes au sein de systèmes dont les dimensions caractéristiques sont de l'ordre de la dizaine de micromètres (*i.e.* $10.10^{-6}\ m\ =\ 10\ \mu m$). Pour fixer les idées, rappellons, les ordres de grandeur relatifs aux "objets" présentés dans le Tableau 7.1 (on rappelle qu'1 namomètre $[nm]$ vaut $10^{-9}m$).
Dans ce tableau, on mentionne par * deux exemples emblématiques des travaux accomplis dans l'exploration du monde de l'*"infiniment petit"*. D'une part, une microguitare, de dimensions $10 \times 2\ \mu m$, a été construite dans le groupe de Craighead, à Cornell (Etats-Unis) [182] en 1997. D'autre part, le nom de l'entreprise IBM a été écrit avec quelques atomes, en 1995.

Taille	Monde du vivant	Systèmes anthropiques
$1\ m$	être humain	voiture
$1\ cm$	coccinelle	puce de carte Vitale
$100\ \mu m$	cheveux	microprocesseur
$1\ \mu m$	mitochondrie	microguitare *
$100\ nm$	ADN	nanotransistor
$1\ nm$	protéine globulaire	mots écrits avec des atomes *

TAB. 7.1 – Des échelles humaines au nanomonde, en passant par les territoires micrométriques. * = voir texte.

Dans cette thèse, les tailles caractéristiques seront comprises entre $10\ \mu m$ et $100\ \mu m$.

Historiquement, on peut considérer les travaux de Poiseuille comme précurseurs dans le domaine de la microfluidique. En 1840, il est arrivé à mesurer des débits dans des tubes en verre dont le diamètre était de l'ordre de $10\,\mu m$ [121]. Plus tard, au cours d'un discours prophétique, intitulé "There is plenty of room at the bottom", qu'il donne en 1959 à Caltech, Richard Feynman balise la date qui est désormais considérée comme l'aube de l'histoire des micro et nanotechnologies. Dans les années 1960 et 1970, le domaine de la "*fluidique*" se développe aux Etats-Unis puis en Europe : il s'agit de construire des systèmes de taille millimétrique pour y étudier des écoulements dont on aurait pu se servir pour réaliser les homologues pneumatiques des composants électriques dédiés à des actions comme l'amplification ou les opérations logiques. Dans les années 1980, l'essor fulgurant de la microélectronique a mis un coup d'arrêt à la fluidique dont l'un des objectifs était de construire des ordinateurs pneumatiques, notamment pour des applications spatiales. Les progrès réalisés, au cours de cette décennie, dans la miniaturisation de divers systèmes, qu'ils soient électriques, mécaniques ou mixtes ont donné naissance au champ des *Micro Electro Mechanical Systems* ou *MEMS*. De dimensions comprises généralement entre $1\,\mu m$ et $300\,\mu m$, ils ont permis à l'homme d'agir de manière complexe à l'échelle micrométrique et non, seulement d'observer, ce qu'il savait faire depuis plusieurs siècles grâce au microscope optique. Les MEMS se sont alors rapidement invités dans notre vie quotidenne. Deux exemples typiques sont d'abord les puces pour airbag (courant 1980) qui contiennent un dispositif intégrant à la fois la détection du choc, le traitement de l'information et les commandes de déclanchement ; ensuite, les têtes d'imprimantes à jet d'encre (dans les années 1990) qui impriment désormais des milliards de pages, de par le monde.

Même si des dispositifs microfluidiques ont été développés entre 1960 et 1990, il s'agissait d'actions relativement confidentielles et isolées. En revanche, au début des années 1990, en capitalisant les idées mises au point pour les MEMS, plusieurs branches scientifiques ont commencé à s'intéresser vivement aux perspectives que pouvaient offrir ces systèmes miniaturisés et conduit à leur développement rapide et pléthorique. Parmi ces réalisations, on compte notamment des systèmes de séparation, de pompage, d'amplification d'ADN, des micromélan-

geurs et des microréacteurs chimiques, pour n'en citer que quelques unes. L'un des objectifs qui sous-tend ces développements est la mise au point de laboratoires sur puce (ou Lab-on-Chip) : grâce à la miniaturisation, on souhaite intégrer, dans un même microsystème, plusieurs outils capables de réaliser l'ensemble d'une analyse, *e.g.* chimique ou biologique. Travailler à de telles échelles revêt plusieurs avantages :

- on peut utiliser une faible quantité de produit à analyser ; on optimise ainsi les coûts lorsqu'il est onéreux et la sécurité lorsqu'il est dangereux à manipuler ;
- certains comportements physiques mis à profit dans ces systèmes permettent de gagner du temps ; ainsi en est-il des transferts thermiques et des cinétiques chimiques ;

nous en reparlerons par la suite. A l'heure actuelle, le domaine de la microfluidique connaît un essor soutenu sous l'influence tant des industriels (pharmacie, chimie, ...) que des chercheurs, donnant lieu à la création d'équipes pluridisciplinaires (*e.g.* physiciens, chimistes, biologistes, électroniciens, mathématiciens ...) dont les objectifs sont de comprendre les phénomènes exotiques qui apparaissent dans ces microsystèmes et d'en tirer parti pour les diverses applications. En effet, un succés commercial comme celui des imprimantes à jets d'encre a été rendu possible grâce à la connaissance approfondie de la dynamique des fluides à microéchelle.

Pour plus de détails sur les applications en microfluidique, on pourra consulter les ouvrages très complets [170, 34] qui décrivent en détails cette jeune discipline ainsi que les deux opus de Karniadakis *et al.* [90, 89].

7.2 Particularités physiques

Milieu continu

Tout d'abord, il convient de préciser un point qui avait été implicitement évoqué dans le chapitre 5, lors de la présentation des modèles adoptés dans cette thèse : l'*hypothèse de milieu continu* est toujours *valide* pour les applications physiques que nous voulons simuler.

Se référant à l'ouvrage de Batchelor [13], on définit le concept de *particule fluide* : il s'agit d'un volume de fluide, dont les dimensions sont négligeables par rapport à la taille caractéristique du domaine, mais contenant un nombre suffisant de molécules pour assurer l'existence d'une valeur constante "locale" (*i.e.* associée à ce volume et obtenue par moyennisation sur l'ensemble des molécules qu'il contient) de la densité. L'hypothèse de milieu continu implique alors la possibilité d'associer un sens défini à la notion de "*valeur en un point*" de diverses quantités caractéristiques du fluide (densité, vitesse, température ...) et suppose qu'elles varient, en général, de manière continue en espace et en temps. En supposant que le milieu est continu, on peut alors dériver des équations qui ont un caractère local et gouvernent l'écoulement du fluide.
Ce type d'hypothèse est typiquement mis en défaut lorsque le libre parcours moyen est du même ordre que les longueurs caractéristiques : on est alors en présence d'un milieu dit "*raréfié*" dont la modélisation fait appel à la *théorie cinétique*, que nous n'aborderons pas ici. Une analyse dimensionnelle classique [90, 89] permet de déterminer différents régimes associés à ces caractéristiques de l'écoulement grâce au nombre de Knudsen Kn, défini par :

$$Kn = \frac{\lambda_f}{L} \tag{7.1}$$

où λ_f est le libre parcours moyen et L la taille caractéristique du domaine. On distingue les régimes suivants :

- pour $Kn \leq 10^{-2}$, on parle de régime d'*écoulement continu* modélisé par les équations de Navier-Stokes ;
- pour $10^{-2} \leq Kn \leq 10^{-1}$, on passe dans le régime des *écoulements "glissants"* car les molécules proches de la paroi n'y adhèrent pas. Le modèle de Navier-Stokes reste valable mais il faut introduire des conditions de glissement pour prendre en compte la physique pariétale ;
- pour $10^{-1} \leq Kn \leq 10$, la raréfaction du milieu commence à prendre le pas, conduisant au régime d'*écoulement transitionnel* : les équations de Navier-Stokes sortent de leur domaine de validité ;
- pour $Kn > 10$, on entre de plein pied dans le régime des *écoulements raréfiés* ; les équations de Boltzmann entrent en jeu pour modéliser ces écoulements gazeux.

A l'échelle des microcanaux, un écoulement de gaz peut parfois exhiber des libres parcours moyens de l'ordre du micromètre, par conséquent, le choix des modèles demande un certain discernement. En revanche, dans nos applications où la section des canaux est de l'ordre de 10 à 100 μm, les écoulements liquides exhibent un caractère continu qui fait des équations de Navier-Stokes le modèle adapté à leur description.

Glissement à la paroi

Au chapitre 5, nous avons aussi introduit une condition aux limites de glissement pour les parois solides. Il convient de discuter ici, plus en détails, quelques considérations physiques associées à cette condition, en suivant le propos de [170].

Si ce type de condition a été dérivé rigoureusement dans le cadre de la théorie cinétique des gaz, notamment par Maxwell [105] (voir aussi [90] – Chapitre 2), il n'en est pas de même pour son application à des écoulements liquides. Rappellons qu'elle s'exprime sous la forme simplifiée (en supposant que la direction z est normale à la paroi et que u est la vitesse tangentielle au mur) :

$$u = L_s \frac{\partial u}{\partial z} \tag{7.2}$$

où L_s est parfois appellée la longueur de Navier, l'un des précurseurs dans l'introduction de ce type de formulation. Il semble qu'il règne actuellement dans les diverses communautés qui utilisent (7.2) un certain flottement pour déterminer des valeurs de L_s. En effet, tant au niveau des interprétations physiques théoriques du glissement que des expériences, on recense des variations de plusieurs ordres de grandeurs allant du nanomètre au micromètre. Les aspects mis en jeu sont aussi variés que les caractéristiques des fluides, de l'écoulement ou l'état de surface de la paroi (géométrie, état hydrophile/phobe). A notre connaissance, la proposition d'une condition, unifiée et définie de manière autonome, constitue encore une question ouverte. Aussi, dans nos simulations, comme nous l'avons déja évoqué, L_s sera un paramètre dont la calibration est fournie par nos collègues experts en physique.

Laminarité

L'utilisation classique du Théorème Π (dit, aussi, "de Vaschy-Buckingham") sur les équations de Navier-Stokes exhibe le célèbre nombre adimensionnel, dit de Reynolds, Re :

$$Re = \frac{\rho V L}{\eta} \tag{7.3}$$

où, ρ est la densité, V et L sont respectivement la vitesse et la longueur caractéristiques de l'écoulement. Enfin, η donne la viscosité. Typiquement, pour les écoulements en microcanaux

que nous allons considérer :

$$\rho \sim 10^3 \tag{7.4}$$
$$\eta \sim 10^{-3} - 10^{-2} \tag{7.5}$$
$$V \sim 10^{-2} - 10^{-1} \tag{7.6}$$
$$L \sim 10^{-5}, \tag{7.7}$$

si bien que :

$$Re \sim 10^{-2} - 10^{-1} \leq 1 \tag{7.8}$$

Etant donné que ce nombre caractérise l'importance relative des effets inertiels vis à vis des effets visqueux, on déduit de la faiblesse traduite par (7.8) que les termes d'inertie de l'équation de Navier-Stokes sont négligeables. Plus précisément [13, 68] :

- le terme non linéaire, $\rho\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}$
- et le terme instationnaire $\rho\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}$

sont négligeables devant le terme visqueux $\nabla.(2\eta D\mathbf{u})$. Par conséquent, le modèle de Navier-Stokes dégénère en modèle de Stokes stationnaire.

Dans la plupart des cas, les microécoulements sont exempts de turbulence : cette laminarité est d'ailleurs une caractéristique utilisée massivement dans les applications. Il convient cependant d'être prudent, lorsque des changements topologiques ont lieu lors de l'évolution d'interfaces bifluides en microfluidique. En effet, sous la forte influence du terme de tension de surface, des vitesses et des accélérations élevées sont générées localement en temps : une description fine de ces phénomènes nécessite donc de conserver les termes instationnaires et d'inertie. Notons tout de même que la prépondérance capillaire induit une convergence vers un écoulement quasi-laminaire, sur des échelles de temps beaucoup plus courtes que celles caractéristiques de l'écoulement (*i.e.* d'ordre L/V). Ceci est d'ailleurs traduit par les contraintes drastiques de la condition de stabilité induite par la tension de surface, comparativement à la CFL liée au transport. Ainsi, après un changement topologique, les interfaces retrouvent rapidement une forme quasi-circulaire (éventuellement contrainte par le confinement). De tels exemples seront présentés dans le chapitre suivant.

Enfin, il existe aussi des écoulements microfluidiques exhibant des nombres de Reynolds très supérieurs à 1. Les imprimantes à jet d'encre, évoquées précédemment, en constituent un exemple célèbre. Dans de tels dispositifs, les vitesses atteignent plusieurs mètres par seconde conduisant à des Reynolds de l'ordre de 100.

Tension de surface

Pour commencer, rappelons qu'en microfluidique, le rapport surface sur volume augmente significativement. Par conséquent, les interfaces jouent un rôle sérieusement plus marqué qu'aux échelles humaines.

Du fait de la mise en contact de différents types de molécules au niveau de l'interface, il existe une énergie résiduelle induite par les interactions moléculaires. On peut la comprendre qualitativement en considérant les deux types de molécules en présence, disons A et B (*cf.* Figure 7.1). Une molécule A complètement entourée de voisines du même type est soumise à des interactions identiques qui induisent une résultante nulle de l'action de son environnement. En revanche, une molécule A située à l'interface est sujette à l'action de molécules voisines de type A et B : la résultante de ces intéractions n'est pas nulle et induit une force résiduelle au niveau de l'interface. On appelle cette force, la *tension de surface*, à laquelle on associe

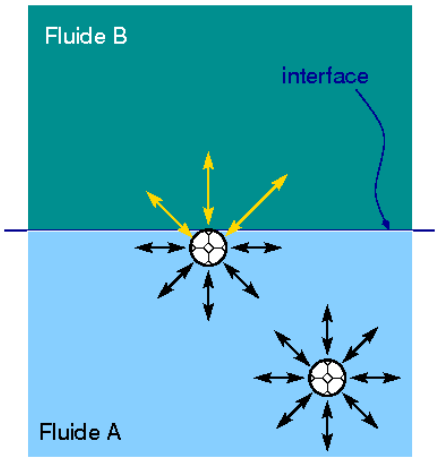


FIG. 7.1 – Interactions moléculaires (schématisées par des doubles-flèches noires et jaunes) pour une molécule complètement immergée dans le fluide A et pour une autre, située à l'interface.

une énergie de surface. Comme nombre de systèmes physiques, une interface va chercher à minimiser son énergie. Intuitivement, chaque molécule A va souhaiter être entourée au maximum de voisines du même type. Ainsi, à volume constant, une interface va converger vers la configuration qui minimise la surface de contact avec le milieu voisin.
Bien évidemment, l'énergie de surface dépend de la nature des éléments constituant l'interface.

L'une des relations classiques impliquant la tension de surface est la loi de Laplace, qui stipule que le saut de pression nécessaire, pour maintenir la forme d'une interface (voir Figure 7.2), est proportionnel à la courbure :

$$[p] = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \tag{7.9}$$

où σ est le coefficient de tension de surface et les R_i sont les deux rayons de courbure de l'interface tridimensionnelle. On comprend donc bien, dès lors, que le terme de tension de surface

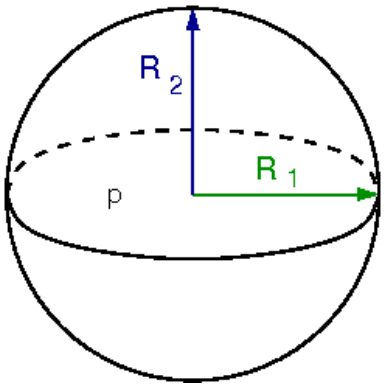


FIG. 7.2 – Illustration de la loi de Laplace pour une interface sphérique en équilibre. Le saut de pression p entre l'intérieur de la sphère et l'extérieur (on suppose que la pression y est nulle) est proportionnel aux rayons de courbure

joue un rôle prépondérant en microfluidique, au même titre que les effets visqueux. En effet, à

ces échelles, les rayons de courbure sont de l'ordre de $10^{-5}\,m$ et le coefficient $\sigma \sim 10^{-2}\ kg\,s^{-2}$, conduisant à des termes d'ordre 10^3. De même, on prend aussi conscience de la négligeabilité des effets gravitaires vis-à-vis des effets capillaires.

Il existe toute une variété d'écoulements de fluides en microcanaux. Nous allons en faire une revue rapide puis détailler les situations précises que nous allons simuler dans cette thèse.

7.3 Applications visées

Aprés avoir introduit le domaine que constitue la microfluidique et détaillé quelques points physiques qui nous concernent en priorité, il convient d'être plus explicite sur certains aspects concrets tels que les canaux utilisés pour étudier ces écoulements ainsi que les objectifs poursuivis.

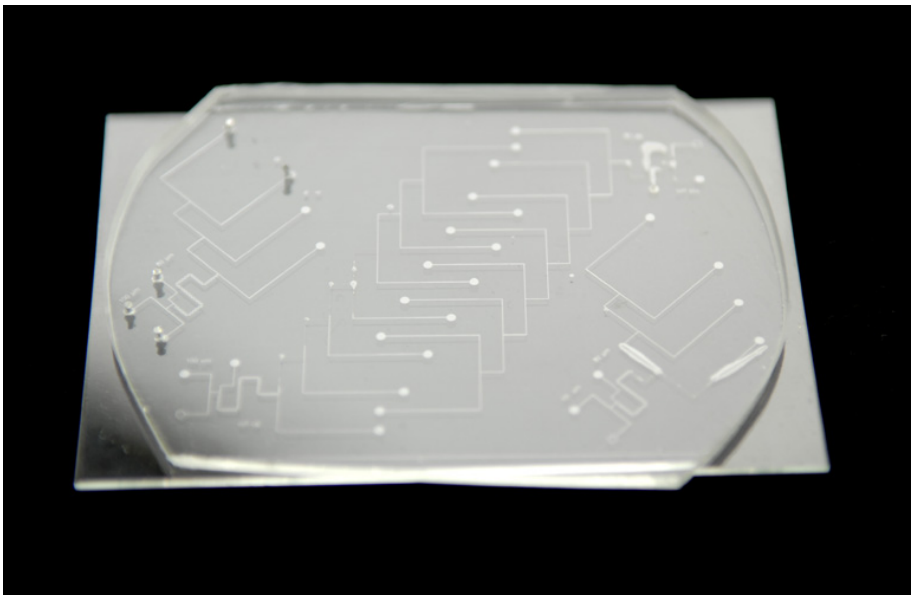


FIG. 7.3 – Un réseau de microcanaux en verre et PDMS

Les microcanaux sont généralement élaborés par les laboratoires spécialisés dans du verre ou du PDMS (une famille de polymère que l'on injecte dans des moules puis chauffe pour obtenir un élastomère contenant le motif des canaux). On pourra se reporter à [170] pour plus de détails sur les différentes techniques de fabrication de ces canaux. L'intérêt des matériaux susnommés est qu'ils sont transparents, on peut donc observer à loisir les fluides qui s'y écoulent. Ce qui n'est pas le cas des microcanaux réalisés en silicium grâce aux techniques issues de la microélectronique. Deux dispositifs microfluidiques sont présentés sur les Figures 7.3 et 7.4. Sur la première, on distingue les réseaux de canaux complexes utilisés. A l'aide d'une succession de jonctions et différents lieux d'injection, on peut introduire les fluides variés que l'on veut mettre en contact et réaliser des mélanges successifs. La seconde figure présente l'alimentation du réseau par quatre tubes en plastique (à gauche) et la récupération d'un mélange multifluide sur le tube de droite. Ces tubes sont généralement reliés à un pousse-seringue automatisé qui pilote l'injection avec la précision requise.

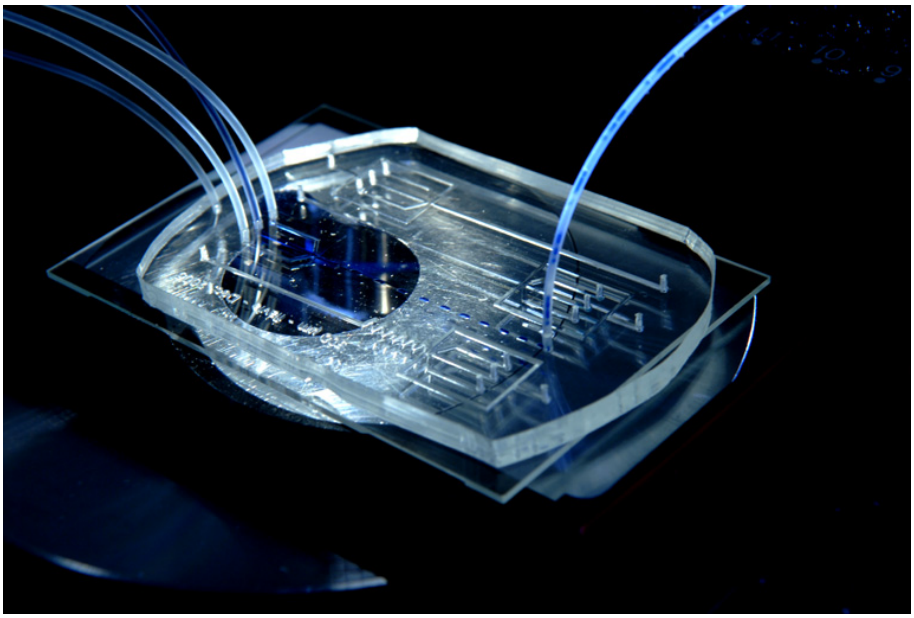


FIG. 7.4 – Un réseau de microcanaux en verre et PDMS alimenté par différents fluides

Examinons maintenant les possibilités offertes par ces réseaux, notamment au niveau des jonctions où les fluides se rencontrent.

Les écoulements parallèles ou "coflow" constituent une classe d'écoulements répandue en microfluidique (cf Figure 7.5). Ils sont, par exemple, utilisés avec des fluides miscibles, pour dé-

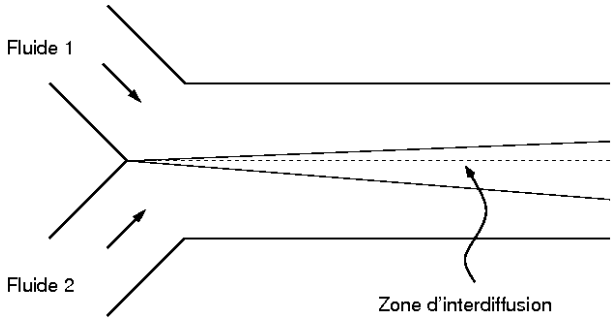


FIG. 7.5 – Configuration "coflow" dans une jonction en Y, avec deux fluides miscibles.

terminer des coefficients d'interdiffusion (voir, par exemple, J.-B. Salmon *et al.* [136]). Lorsque les deux fluides se rencontrent, ils s'écoulent parallèlement et, à l'interface, une zone de mélange se crée et s'amplifie dans la direction aval. En présence de fluides immiscibles ce type de dispositif peut aussi permettre l'étude des propriétés rhéologiques des fluides (comme l'ont fait Guillot *et al.* dans [67]).

La manipulation d'écoulements de plusieurs fluides immiscibles est l'un des domaines où la microfluidique excelle grâce à un contrôle élevé réalisable à ces échelles. Il est, en effet, possible de créer et manipuler des émulsions monodisperses.
Une *émulsion* liquide/liquide est constituée de deux liquides dont l'un est réparti en un en-

semble dense de fines gouttes (on parle de *phase dispersée*) au sein de l'autre (appelée *phase porteuse*). Une émulsion est qualifiée de *monodisperse* lorsque les structures de la phase dispersée ont toutes la même taille. Le contrôle des écoulements accompli dans les microcanaux se traduit par la possibilité de créer des dizaines de gouttes à la minute, qui ont toutes la même taille. De telles gouttes peuvent servir à produire notamment des polymères, des mousses ou à transporter des protéines cristallisées. Les applications déja réalisées sont multiples et celles en développement sont prometteuses [187]. La création et le transport des microgouttes ont généré une importante littérature en physique et chimie – voir par exemple [10, 159, 85, 187] et leurs références.

Les gouttes peuvent aussi servir de microréacteurs au sein desquels il est possible d'étudier des cinétiques chimiques très rapides, de l'ordre de $10^{-3}\,s$ [156]. Ces réacteurs de forme stationnaire, se mouvant à vitesse constante dans le canal, permettent de créer une équivalence entre la distance parcourue *et* le temps passé dans la goutte par le mélange. Plusieurs types de géométries sont utilisés pour créer de telles gouttes. Outre les jonctions en "T" ou "Y", sont utilisés des dispositifs qualifiés de "flow focusing". Ils consistent à pincer un jet de fluide à l'aide du deuxième fluide injecté latéralement. Une telle géométrie (*cf.* Figure 7.6) a été réalisée, en PDMS, par Anna *et al.* dans [10] où sont présentés de nombreux régimes d'émulsions (*cf.* Figure 7.7).

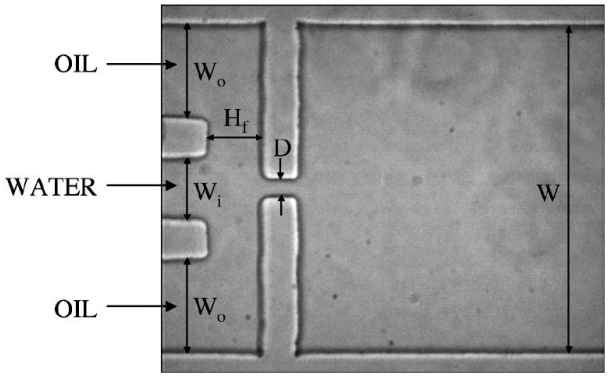


FIG. 7.6 – Configuration "flow focusing" utilisée par Anna *et al.* dans [10]. Dans le canal central, à gauche, est injectée de l'eau dont le jet se trouve pincé par l'arrivée latérale d'huile. Le mélange bifluide immiscible passe alors au travers du rétrécissement D pour se retrouver dans la cavité de droite (de largeur W).

La focalisation d'écoulement peut aussi être réalisée avec des canaux en croix à l'image de la Figure 7.8. Nous utiliserons, entre autres, ce même type de configuration pour simuler la création de gouttes en microcanaux.

Bien connue d'un point de vue physique, il semble cependant que la dynamique des gouttes en microcanaux n'ait été qu'assez peu appréhendée du point de vue de la simulation numérique. En ce qui concerne les imprimantes à jet d'encre, on peut mentionner la série de travaux de Yu, Sakai et Sethian [189, 190, 191] dans lesquels est présenté un nombre important de simulations tant pour des fluides newtoniens que pour des fluides viscoélastiques ; on rappelle que pour ces applications, le nombre de Reynolds est relativement élevé, *i.e.* entre 40 et 90. Remarquons que pour de tels régimes d'écoulements, les vitesses rapides mises en jeu font que les contraintes de stabilité numérique présentées au chapitre 6 sont complètement relaxées. En utilisant une méthode de champ de phase, De Menech a réalisé des simulations de création

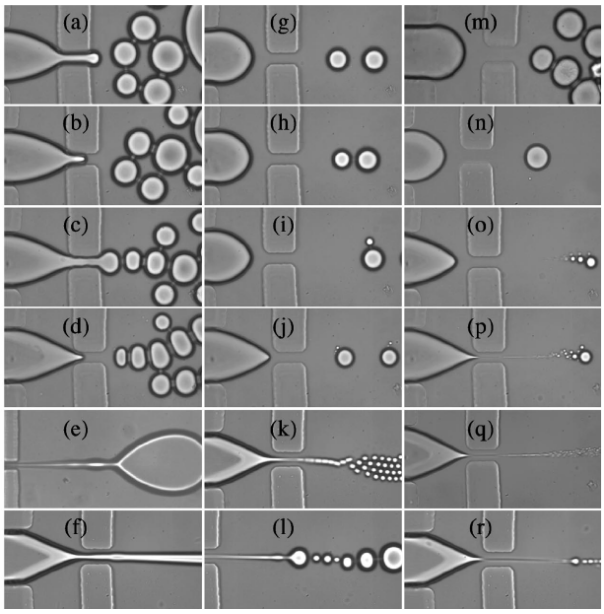


FIG. 7.7 – Différents régimes d'émulsions mis à jour dans [10].

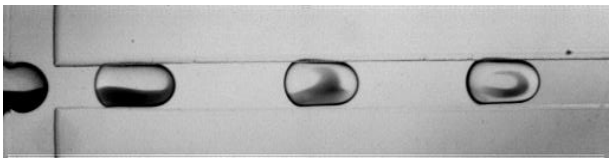


FIG. 7.8 – Géométrie de canaux en croix.

de gouttes, au niveau d'une jonction [107]. Les effets du confinement et de l'inertie ont été étudiés très récemment par Renardy, dans [128] et en utilisant la méthode VOF-PROST.

Dans la suite, nous allons nous attacher plus particulièrement à étudier les différentes dynamiques de mélange au sein de gouttes qui évoluent dans des microcanaux, où le nombre de Reynolds est inférieur à 1. C'est ce type de situations, dans lesquelles les vitesses sont faibles, qui a mis pleinement à jour les difficultés numériques induites par la tension de surface et nous a conduit à mener l'analyse du chapitre 6. Dans un récent article, Sarrazin *et al.* [137] (2006) mettent en évidence expérimentalement des zones sans mélange et proposent deux simulations numériques, l'une en 3D et l'autre en 2D qui donnent un éclairage sur ce phénomène. Cet article constituera donc un point de comparaison efficace pour valider nos calculs. Puis, nous mettrons à jour des comportements physiques nouveaux, au regard de notre connaissance actuelle de la littérature. C'est ce que nous allons décrire dans le chapitre suivant.

Chapitre 8

Simulations numériques en 2D

Dans ce chapitre, nous allons présenter des simulations numériques d'écoulements en microcanaux. Elles ont été obtenues à l'aide d'un code que nous avons entièrement développé au cours de cette thèse et qui intègre tant les méthodes actuelles de l'approche *Level Set* (présentées aux chapitres 2 à 4) que celles introduites dans les présents travaux (*cf.* chapitre 6). Ces résultats numériques sont comparés à des expériences physiques, en particulier pour étudier la dynamique de mélange au sein de microgouttes.

8.1 Modèle numérique

Le code de calcul qui a produit les simulations numériques de ce chapitre résoud les équations de la formulation *Level Set* suivante :

$$-\nabla.(2\eta D\mathbf{u}) + \nabla p = \sigma\kappa\delta(\phi)\mathbf{n} \quad \forall(t,\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega \tag{8.1}$$

$$\nabla.\mathbf{u} = 0 \quad \forall(t,\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \tag{8.2}$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\phi = 0 \quad \forall(t,\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \tag{8.3}$$

dans une géométrie bidimensionnelle mettant en jeu une jonction de canaux rectilignes, dont la Figure 5.4 en est un exemple typique. Le système de coordonnées est cartésien (x, y) et les canaux sont alignés avec les axes du repère induit. L'écoulement est ici modélisé par une équation de Stokes car les phénomènes inertiels sont négligeables dans les configurations microfluidiques simulées. De plus, l'évolution en temps n'intervient qu'à travers l'équation de transport. La méthode de résolution est identique à celle présentée au chapitre 5, en tenant compte de l'absence des termes instationnaires et d'inertie (remarquons qu'un moyen simple pour obtenir (8.1) consiste à prendre $\rho = 0$ dans l'équation de Navier-Stokes (5.11)).

Nous récapitulons brièvement l'ensemble des composantes implémentées dans le code :

- discrétisation volumes-finis des équations de l'écoulement
- et résolution par une méthode de Lagrangien Augmenté (alliée à une méthode BiCGstab pour l'inversion des systèmes linéaires) ;
- conditions aux limites de glissement à la paroi ;
- schéma WENO5 pour discrétiser les gradients en espace de l'équation de transport (on peut aussi activer des schémas ENOi, $i = \{1, 2, 3\}$) ;
- schémas TVD RK d'ordre 1 à 3 pour la discrétisation en temps ;
- redistanciation à l'aide de :
  - l'équation de redistanciation discrétisée de manière réellement *upwind*

  - ou de la méthode *Fast Marching* ;
- condition de stabilité dérivée au chapitre 6 ;
- méthode de splitting présentée au chapitre 6 ;
- implémentation et couplage de ces développements en Fortran 90.

Notons que ces outils sont aussi adaptés dans le code axisymétrique qui fera l'objet du chapitre suivant.

8.2 Tests et Changements topologiques

Dans cette section, nous réalisons des tests classiques qui mettent en jeu des effets de tension de surface prépondérants ainsi que des changements topologiques. Ils permettent d'examiner le comportement de la méthode *Level Set* et la robustesse du code.

Nous étudions, pour commencer, une ellipse qui au temps $t = 0$ est placée dans un microcanal. Le volume de cette goutte est tel qu'elle va converger vers une forme non confinée quasi circulaire, grâce à la tension de surface, tout en se déplaçant avec l'écoulement. La largeur du canal est de 200 μm. La vitesse d'injection vaut $u_{inj} = 8.10^{-3}$m/s. La viscosité de la goutte vaut 10^{-3}Pa.s alors que celle de la phase porteuse est de 10^{-2}Pa.s. On affecte la valeur du coefficient de tension de surface à $\sigma = 5.10^{-2}$N/m. La Figure 8.1 montre l'évolution d'une telle goutte : sous l'action prépondérante des forces capillaires, elle exhibe rapidement une forme proche du cercle. On peut faire le lien avec la Remarque 6.1 du chapitre 6 où une telle goutte restait immobile dans le canal (*cf.* Figure 6.4). Ici, on constate qu'une fois qu'elle a atteint la forme asymptotique induite par la tension de surface et l'écoulement, elle se translate sans aucune instabilité dans le canal. Ceci est rendu possible grâce à la condition de stabilité dérivée au chapitre 6.

Considérons, ensuite, le cas de la collision entre deux gouttes qui arrivent par deux branches opposées d'un canal et fusionnent. La goutte obtenue est évacuée par une troisième branche orthogonale aux deux premières (voir Figure 8.2). Les canaux ont une section de 100 micromètres. Les viscosités valent 10^{-3} $kg/(ms)$ dans la goutte et 10^{-2} $kg/(ms)$ dans la phase continue. Le fluide porteur est injecté avec une vitesse $u_{in} = 5.10^{-2}$ m/s. Le coefficient de tension de surface vaut $\sigma = 2.10^{-3}$ N/m. Notons que l'on prend deux gouttes initiales identiques en forme mais n'ayant pas une position symétrique vis-à-vis du canal de sortie. En effet, la goutte de gauche est légèrement plus proche de l'axe de symétrie que la goutte de droite. Il faut noter que ce léger décalage croît avec le temps car la dynamique de la goutte de gauche, qui arrive en premier, joue sur celle de sa voisine de droite qui est légèrement freinée lorsqu'elle vire pour s'engager dans le canal de sortie. Il en résulte une fusion non symétrique. C'est ce que l'on observe sur la partie haute du canal de sortie. De plus, on constate bien l'effet prépondérant de la tension de surface qui, dès que la fusion a eu lieu, induit le "gonflement" pratiquement instantané de la nouvelle goutte, de manière à minimiser l'énergie de surface. Cet effet stabilisant conduit ensuite à la symétrisation de la forme de la goutte qui se recentre dans le canal lors de sa propagation vers la sortie.

Grâce à cette approche *Level Set* on constate que l'on obtient, de manière simple, des simulations qui prennent bien en compte les effets de tension de surface et les changements topologiques.

Dans le même esprit, la Figure 8.3 présente le cas d'un train de gouttes qui montent dans

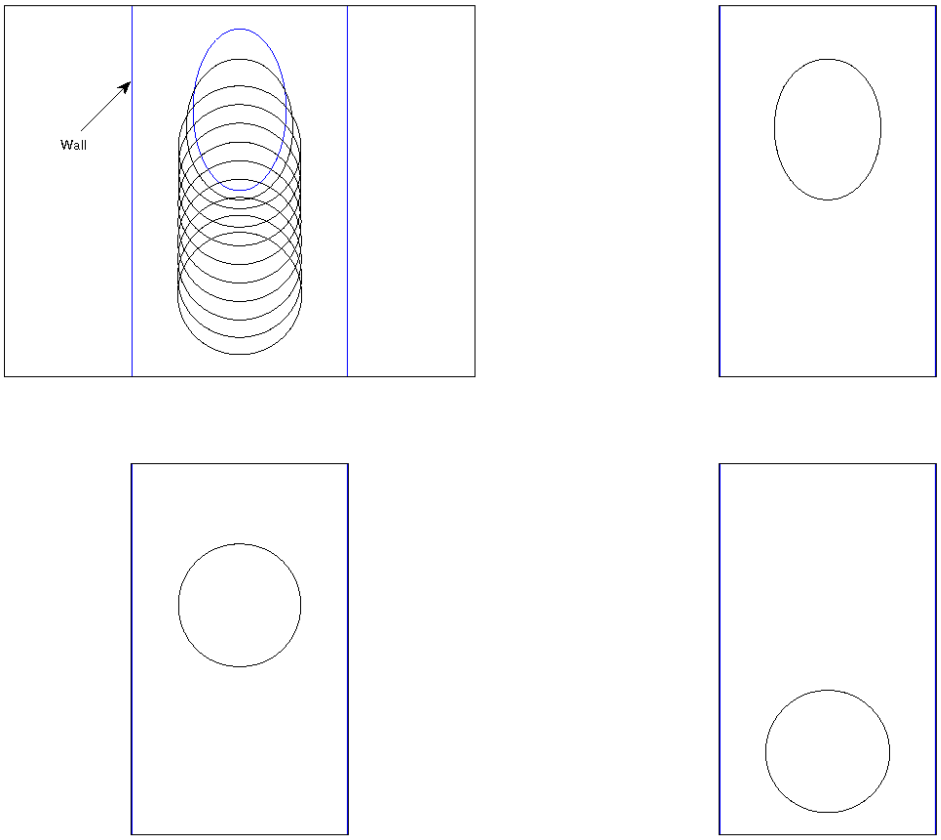


FIG. 8.1 – Simulation d'une ellipse non confinée. En haut à gauche : interface initiale (en bleu) et les interfaces ultérieures (en noir) superposées. Images suivantes (de haut en bas, puis de gauche à droite) : les interfaces successives à $t = 1.7$, 3.4 et 17 ms qui montrent la convergence vers une forme asymptotique quasi circulaire. La même partie du canal est présentée sur toutes les figures.

le canal vertical puis sont évacuées par les canaux latéraux, aprés avoir rencontré le mur supérieur. On observe deux fusions successives : l'une entre la première et la deuxième goutte (image de droite en haut), l'autre entre la troisième goutte et la goutte issue de la première fusion (image du bas). Entre chaque collision, on peut voir la combinaison des effets du confinement, de la tension de surface et du forçage de l'injection. Cela met en valeur la bonne capacité de l'approche de simulation mise en oeuvre pour étudier les dynamiques de gouttes variées mises en jeu dans les dispositifs microfluidiques.

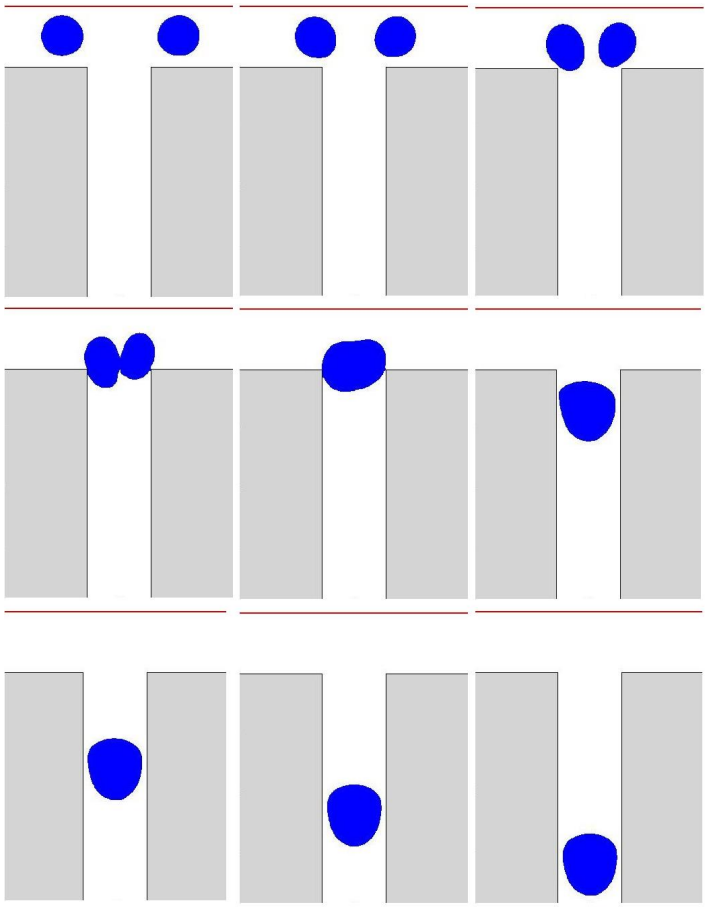


FIG. 8.2 – Collision entre deux gouttes (en bleu) qui se rencontrent et fusionnent. La goutte unique obtenue se propage alors vers le bas dans le canal vertical. La séquence d'images est ordonnée de gauche à droite, puis de haut en bas. Les zones grisées matérialisent les parois solides.

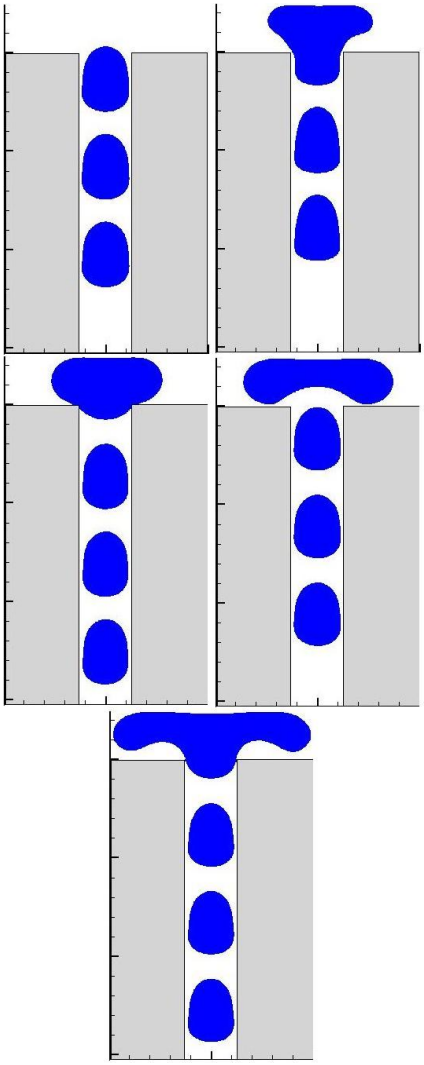


FIG. 8.3 – Train de gouttes. La séquence d'images est ordonnée de gauche à droite, puis de haut en bas. Les zones grisées matérialisent les parois solides. Des gouttes sont injectées à la base du canal vertical, se déforment au contact du mur supérieur ou fusionnnent avec une goutte déjà présente puis s'évacuent par les canaux latéraux.

Remarque 8.1 : création de gouttes en 2D

Comme nous l'avons évoqué précédemment, certains réseaux de microcanaux utilisent des jonctions en croix, aussi connues sous le qualificatif "*flow focusing*" puisqu'en injectant un fluide qui se voit "pincé" par un autre arrivant par des canaux latéraux, on peut contrôler un jet et créer des gouttes (*cf.* Figure 8.4).

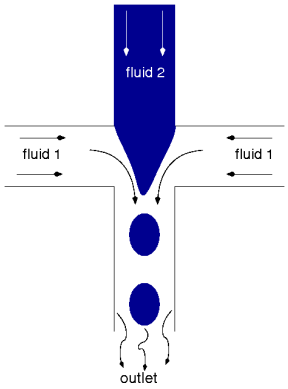


FIG. 8.4 – Géométrie en croix ou "flow focusing", pour créer des gouttes

Cependant, il n'est pas possible de simuler la formation de gouttes avec un code purement 2D, comme celui évoqué jusqu'à maintenant. Ceci est dû au fait qu'un jet 2D est toujours stable. En effet, (*cf.*Figure 8.5) toute perturbation de l'enveloppe d'un tel jet induit nécessairement une augmentation de la surface (*i.e.* une augmentation de l'énergie de surface) qui est toujours contrôlée par la tension de surface. De fait, ce terme vise à faire converger le système vers un état énergétiquement favorable. En revanche, un jet 3D comme le cylindre de la Figure 8.6 peut se destabiliser car il existe des perturbations qui permettent une diminution de la surface du jet (voir par exemple l'article fondateur de Rayleigh en 1879 [127]). Dans ces cas, la tension de surface provoque la rupture du jet conduisant à la création de gouttes dont les formes d'interfaces permettent de minimiser l'énergie de surface. Pour plus de détails sur ces

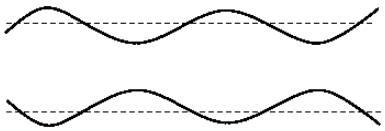


FIG. 8.5 – Un jet 2D est toujours stable car une perturbation induit toujours une augmentation de la longueur de l'enveloppe, donc une situation énergétiquement défavorable

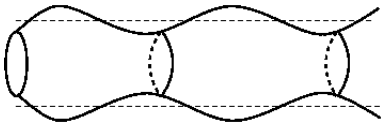


FIG. 8.6 – Un jet 3D peut être déstabilisé car il existe des configurations d'interface qui permettent de diminuer la surface de l'enveloppe conduisant à un état énergétique plus favorable.

points, on pourra consulter, par exemple, la thèse de Pierre Guillot [66].

L'objet de cette remarque est de présenter un artifice permettant de simuler la destabilisation d'un jet 2D avec un code purement 2D. Cette approche n'a aucune prétention à décrire un phénomène physique réel. Il s'agit essentiellement d'une astuce numérique naturelle qui permet d'observer le comportement de la méthode *Level Set* lors de la simulation de la création de goutte dans une géométrie en croix 2D.

L'approche est la suivante. On transforme le terme de courbure 2D (calculé avec ϕ) présenté auparavant, en un terme de courbure 3D grâce à l'hyphothèse d'une extension axisymétrique de notre jet 2D qui permet de créer un jet de révolution en 3D. Plus précisément, au lieu de considérer la courbure bidimensionnelle :

$$\kappa = \nabla.\mathbf{n} \tag{8.4}$$

on introduit la courbure moyenne calculée en 3D par :

$$\kappa = \nabla.\mathbf{n} + \frac{1}{R_2} \tag{8.5}$$

où R_2 est le rayon de courbure dans le plan orthogonal au domaine de calcul bidimensionnel (voir Figure 8.7).

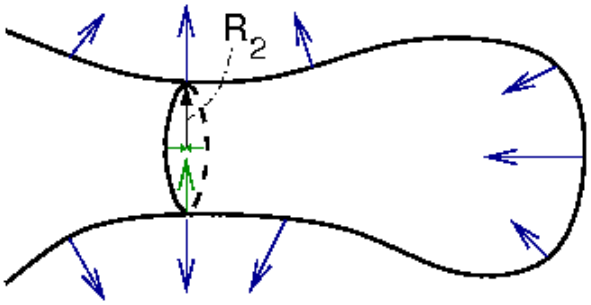


FIG. 8.7 – Extension de la courbure bidimensionnelle. Les flèches bleues représentent les forces de tension de surface dans le plan de calcul. Les flèches vertes représentent la tension de surface dans le plan orthogonal

Le rayon R_2 est obtenu en considérant que le jet est axisymétrique. Ainsi, il suffit d'évaluer la largeur du jet 2D pour déterminer la valeur de R_2. La fonction ϕ permet un calcul direct de cette largeur. La relation (8.5) montre que nous disposons maintenant d'un terme correctif qui peut induire une instabilité. En effet, $1/R_2$ a toujours le même signe tandis que le signe de $\nabla.\mathbf{n}$ dépend de la courbure de l'interface dans le domaine de calcul 2D. Par conséquent, quand le jet s'affine, $1/R_2$ peut changer le signe du terme de courbure global et donner ainsi une force qui peut conduire à la rupture du jet (*cf.* Figure 8.7).

Résultats numériques

On considère un jet qui se développe depuis le canal supérieur, dans une configuration en croix. L'interface initiale et les caractéristiques géométriques de l'écoulement sont représentées sur la Figure 8.8.

Le canal a une largeur de 50 μm. La vitesse d'injection est $u_{inj} = 10^{-2}$m/s. La viscosité du jet vaut $\eta_2 = 10^{-3}$Pa.s alors que celle de la phase continue vaut $\eta_1 = 10^{-2}$Pa.s. Le coefficient

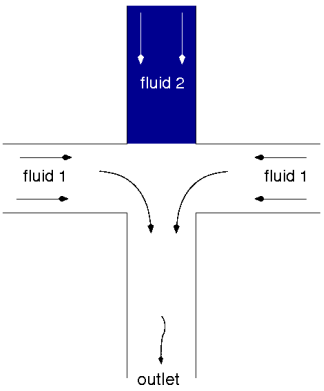


FIG. 8.8 – Interface initiale et configuration de l'écoulement

de tension de surface vaut $\sigma = 5.10^{-2}$N/m.

On calcule deux types d'évolution de jets. La première avec un terme de tension de surface 2D classique (8.4), la seconde avec un terme 3D modifié (8.5). Les évolutions en temps de ces deux jets sont représentées respectivement sur la colonne de gauche et la colonne de droite de la Figure 8.9. Les images sont prises au même instant sur une ligne donnée ; on a réalisé un zoom sur la zone de formation de la goutte. Ceci permet de comparer les différents comportements relativement à la formulation de la tension de surface. On observe que le jet "2D" reste stable alors que le jet "3D" conduit à des gouttes, en accord avec les considérations énergétiques évoquées précédemment.

On observe une légère asymétrie de l'interface lorsque la goutte se forme ; ceci est dû au calcul de courbure dont la précision est mise en défaut lorsque le jet est très fin.

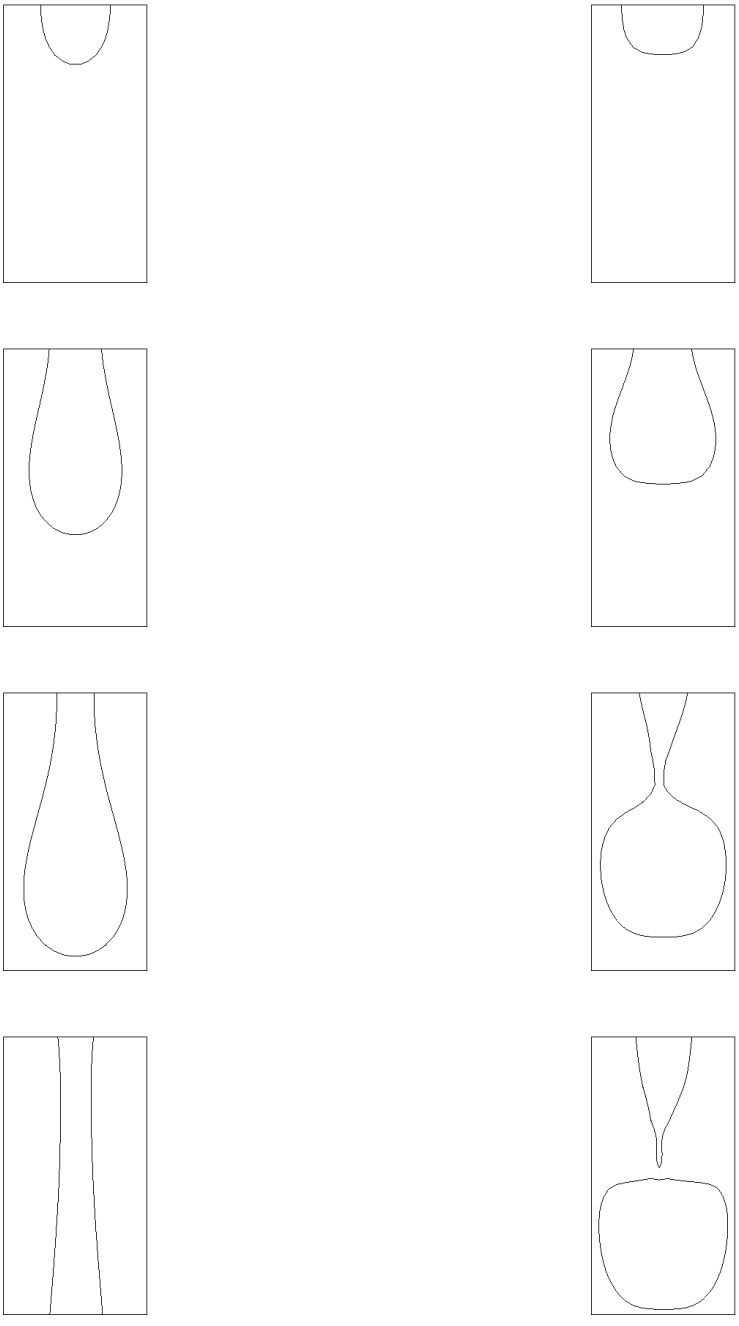


FIG. 8.9 – Simulation d'un jet microfluidique. A gauche : tension de surface 2D, le jet ne se casse pas. A droite : tension de surface 3D, des gouttes se forment.

8.3 Expériences physiques et régimes de mélanges

Nous avons vu que, grâce à la prépondérance des effets de la tension de surface, les écoulements de deux fluides immiscibles en microcanaux permettent de créer des émulsions monodisperses dont les gouttes de taille similaire servent de microréacteurs. Grâce à de tels dispositifs, on peut étudier des réactions chimiques très rapides, de l'ordre de la milliseconde.

Dans cette section, nous allons mettre à profit la méthode de splitting décrite précédemment pour simuler précisément la dynamique au sein de microgouttes qui se déplacent dans un canal droit et ont une forme stationnaire : elles constituent le prototype même des microréacteurs. Comme nous sommes intéressés par la dynamique de mélange, nous présentons essentiellement les champs de vitesse et les lignes de courants dans le référentiel de la goutte, pour des interfaces qui se translatent avec une forme stabilisée. Nous sommes parfaitement conscients qu'en microfluidique, à cause du confinement, les effets 3D doivent être considérés pour capter une description complète de l'écoulement. Cependant, nous verrons que les simulations 2D qui suivent constituent un premier pas pour obtenir une description qualitative de la dynamique de mélange qui est en parfait accord avec les expériences physiques. Dans toutes les images suivantes, les gouttes se meuvent de haut en bas. Pour toutes ces simulations, nous avons utilisé 36 mailles pour discrétiser la section du canal. Il a été vérifié que les résultats sont invariants lorsque l'on raffine le maillage ; ce qui montre que les calculs ont parfaitement convergé.

On propose une série de figures avec des microgouttes confinées. Deux tailles de gouttes sont considérées. L'une, que l'on qualifiera de "petite", a une largeur de l'ordre de celle du canal $D = 120$ micromètres et une longueur de l'ordre de $1.3D$. L'autre, que l'on qualifiera de "grande", a une largeur de l'ordre de celle du canal et une longueur de l'ordre de $2D$. La vitesse d'injection dans le canal est $u_{in} = 0.2$ m/s. La viscosité de la goutte vaut $2.10^{-2}\ kg/(ms)$ et celle de la phase continue vaut $4.10^{-2}\ kg/(ms)$. Le coefficient de tension de surface vaut $\sigma = 3.10^{-2}$ N/m. Dans la suite, nous appellerons ces données, les "données de référence". La petite goutte est présentée sur la Figure 8.10 avec le champ de vitesse et quelques lignes de courants dans le référentiel de la goutte. De même, la grande goutte est présentée sur la Figure 8.11.

La comparaison des Figures 6.8, 8.10 et 8.11 permet de saisir la modification de la dynamique à l'intérieur de la goutte due tant au confinement qu'à la variation du volume de la goutte. Il apparaît que dans tous les cas, il existe une zone de recirculation majoritaire, au centre de la goutte, qui provoque le mélange. De plus, se révèlent deux zones plus petites, à l'avant et à l'arrière de la goutte, où le fluide est piégé (en microfluidique, il est d'usage de parler de "zones mortes"). Ce phénomène a été observé expérimentalement en utilisant des traceurs passifs ou du colorant à l'intérieur des gouttes [31, 137, 32] ; et il l'a aussi été numériquement dans [137]. Nous présentons des séquences d'images filmées aux cours d'expériences physiques [31, 32]. Sur la Figure 8.12, l'expérience consistait en l'injection de colorant qui réagit ensuite chimiquement dans la microgoutte. Nous n'insistons pas ici sur la réaction chimique mais plutôt sur le comportement dynamique du colorant dans la goutte : on observe qu'il est majoritairement propagé au centre de la goutte et non à l'avant. La zone de recirculation autonome à l'avant de la goutte, n'échangeant pas de fluide avec le centre, se voit donc ici matérialisée. Une autre expérience est présentée sur la Figure 8.13 où des microgouttes, contenant des traceurs passifs, se meuvent avec une forme stationnaire. Ce film montre que les traceurs se déplacent le long de lignes de courants du type de la Figure 8.10, dans le centre de la goutte et que certains traceurs restent piégés à l'arrière. Ceci met en évidence les petites zones de recirculation à l'arrière de la goutte.

Les changements de la dynamique dûs à l'inversion des viscosités entre la phase continue et la phase dispersée sont présentés sur la Figure 8.14 qui peut être comparée à la Figure 8.10.

L'effet du changement de la vitesse d'injection u_{in} est présenté sur les Figures 8.15 et 8.16 où l'on a affecté $u_{in} = 0.1$ m/s. Une nouvelle fois, la forme de l'interface est modifiée de concert avec la dynamique de mélange à l'intérieur. On note que, de manière naturelle, une baisse de la vitesse induisant une plus forte influence de la tension de surface, les interfaces ont une forme plus sphérique à l'avant et à l'arrière de la goutte. Cet effet est d'autant plus accentué que la vitesse diminue comme le montre la comparaison des Figures 8.10/8.11, 8.15/8.16 et 8.17/8.18 où, pour ces dernières, $u_{in} = 0.05$ m/s.

Le rapport de viscosité r_η entre la phase continue et la phase dispersée joue aussi un rôle dans la modification de la dynamique de mélange au sein des microgouttes. Les Figures 8.19 et 8.20 montrent les résultats de simulations où les viscosités sont modifiées comme suit : la viscosité de la goutte vaut $2.10^{-3}\ kg/(ms)$ et celle de la phase continue vaut $2.10^{-2}\ kg/(ms)$, soit un rapport $r_\eta = 10$ (courant en microfluidique). La comparaison avec le cas de référence, où $r_\eta = 2$, montre que l'augmentation du rapport de viscosité induit un renforcement des recirculations à l'avant et à l'arrière de la goutte ainsi qu'un recul du coeur de la recirculation centrale.

On présente enfin un troisième type de taille de goutte dont la largeur est de l'ordre de celle du canal et la longueur est de l'ordre de $2.5D$. On utilise les données de référence avec deux valeurs pour la vitesse d'injection $u_{in} = 0.2$ m/s (Figure 8.21) et $u_{in} = 0.02$ m/s (Figure 8.22). On constate une nouvelle fois l'influence croissante de la tension de surface entre les Figures 8.21 et 8.22 : les recirculations à l'avant de la goutte se renforcent comme le révèlent les lignes de courants de la Figure 8.22. La zone de recirculation frontale marquée a provoqué une diminution de la zone de mélange centrale, comparativement à la Figure 8.21.

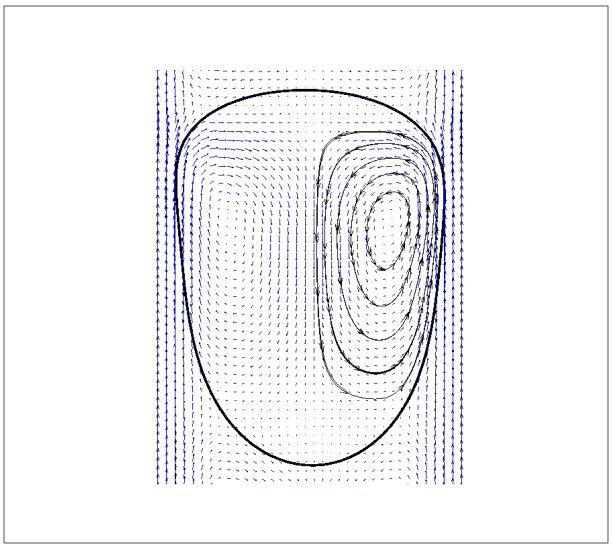


FIG. 8.10 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence

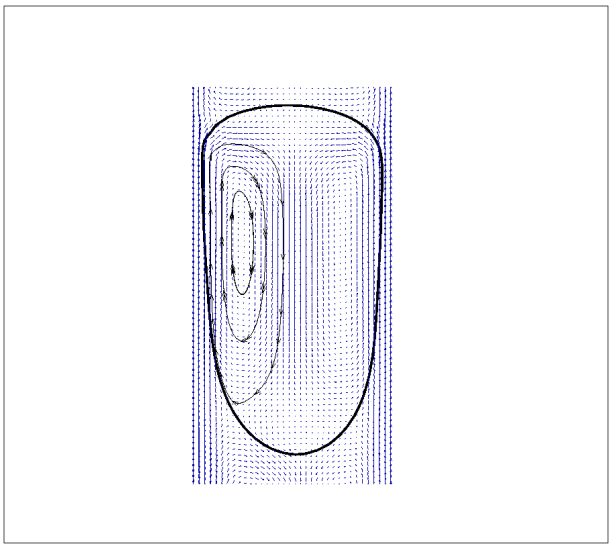


FIG. 8.11 – Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence

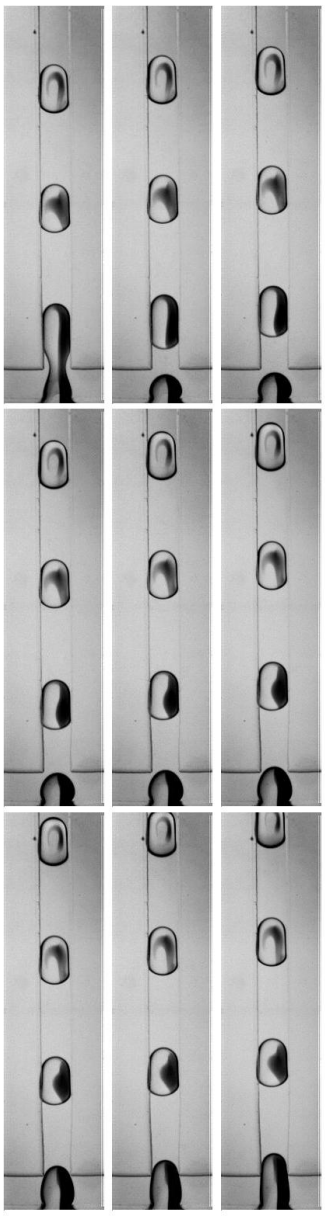


FIG. 8.12 – Quelques instantanés d'une expérience physique [31, 32] où l'on voit des micro-gouttes se former dans un canal en croix et se propager vers le haut. La séquence est ordonnée de gauche à droite puis de haut en bas. Les gouttes contiennent un colorant (couleur foncée, dans la moitié droite) qui se propage essentiellement dans la zone centrale et n'envahit pas l'avant de la goutte, mettant en évidence la zone morte frontale.

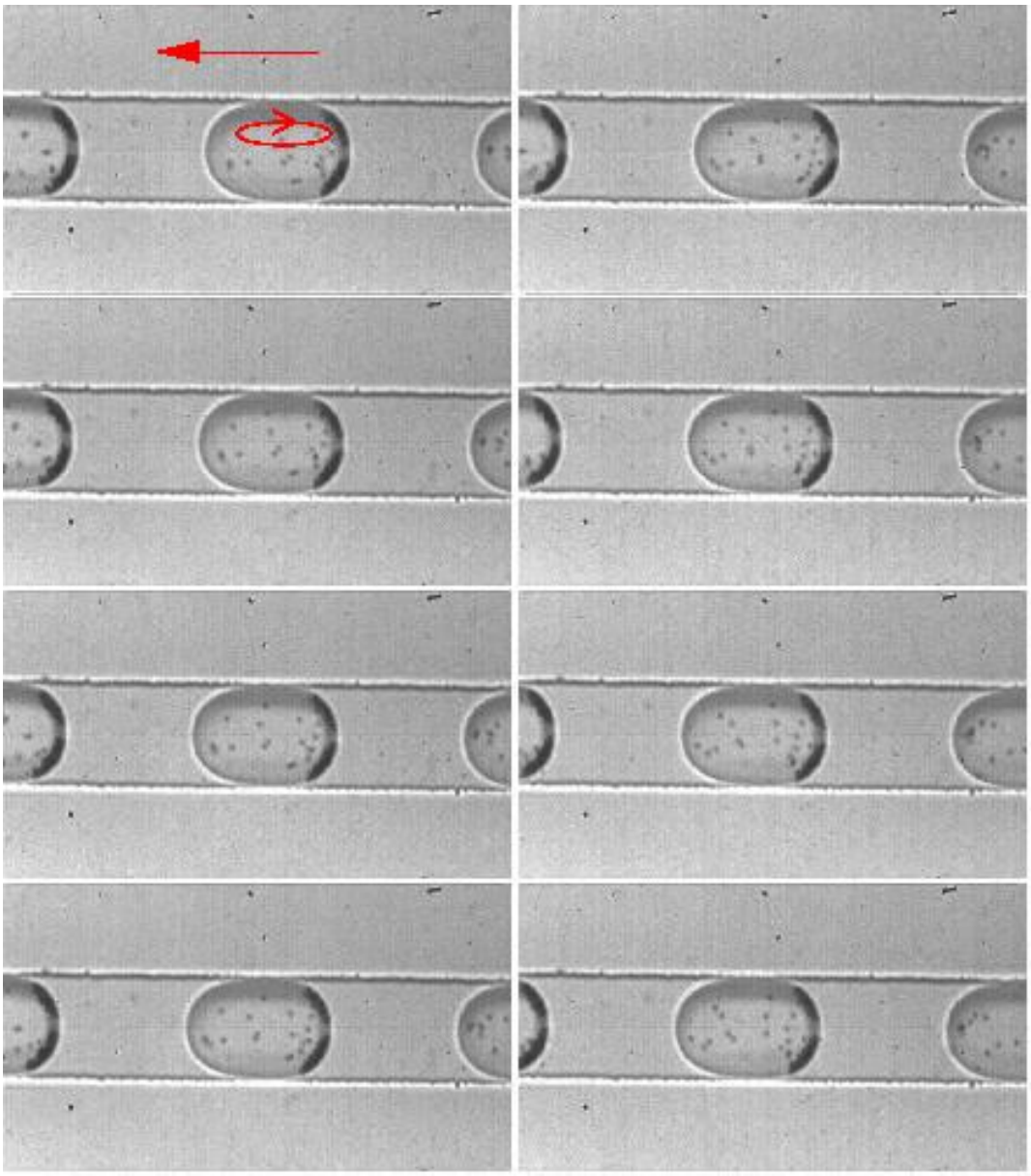


FIG. 8.13 – Quelques instantanés extraits du film d'une expérience physique [31, 32] où des microgouttes se déplacent de la droite vers la gauche (flèche rouge horizontale). La séquence est ordonnée de haut en bas puis de gauche à droite. Les gouttes contiennent des traceurs passifs (petits points sombres dans les gouttes) qui se déplacent dans le sens indiqué sur la courbe fermée rouge. Leurs trajectoires sont du même type que celles exhibées par les lignes de courants de la Figure 8.10. De plus, on observe que certains traceurs restent piégés à l'arrière de la goutte.

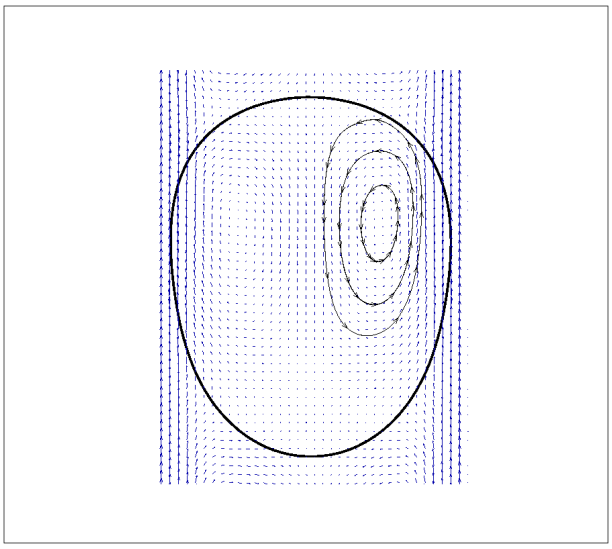


FIG. 8.14 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que les viscosités dans la goutte et de la phase continue sont échangées.

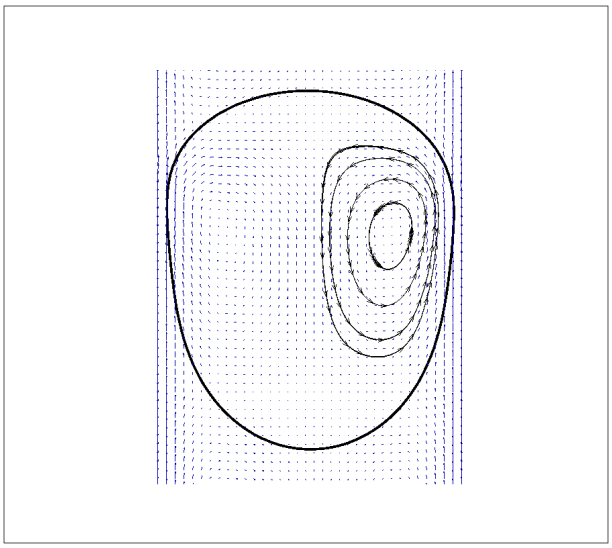


FIG. 8.15 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.1$ m/s

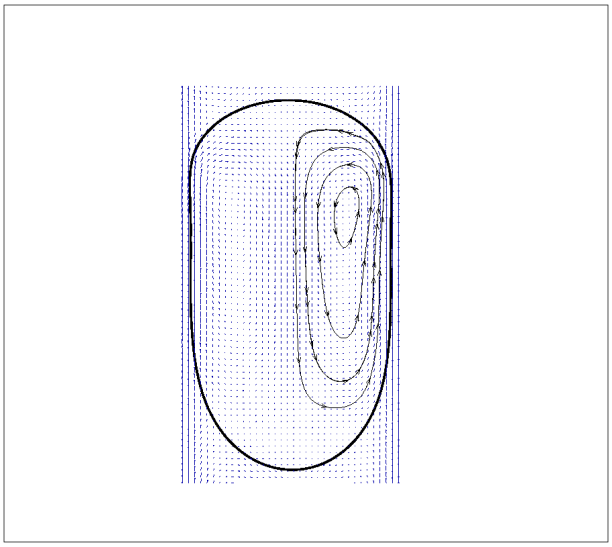


FIG. 8.16 – Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.1$ m/s

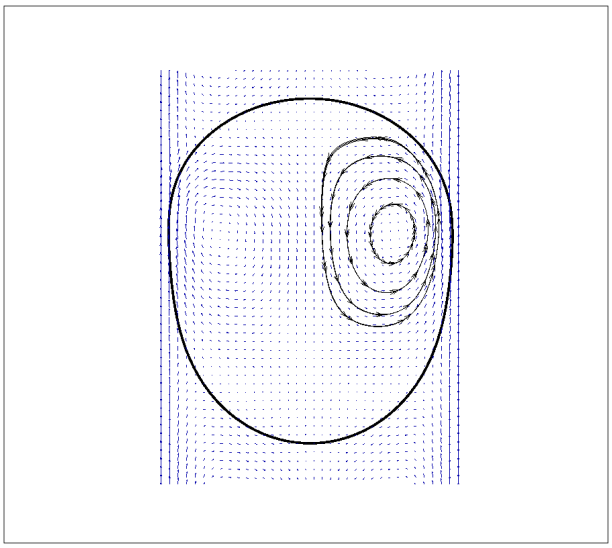


FIG. 8.17 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.05$ m/s

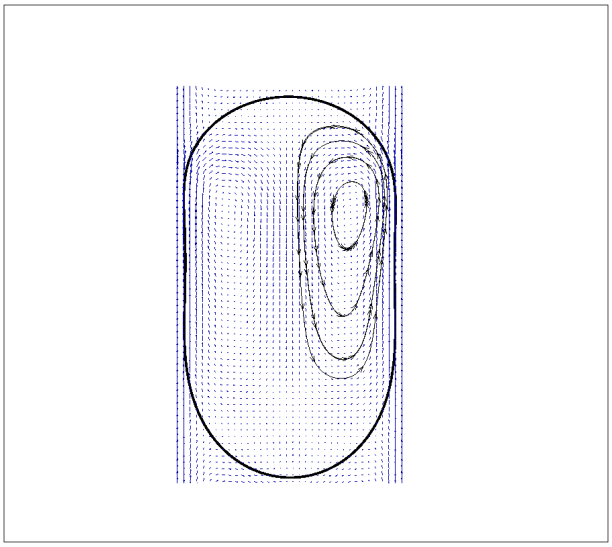


FIG. 8.18 – Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.05$ m/s

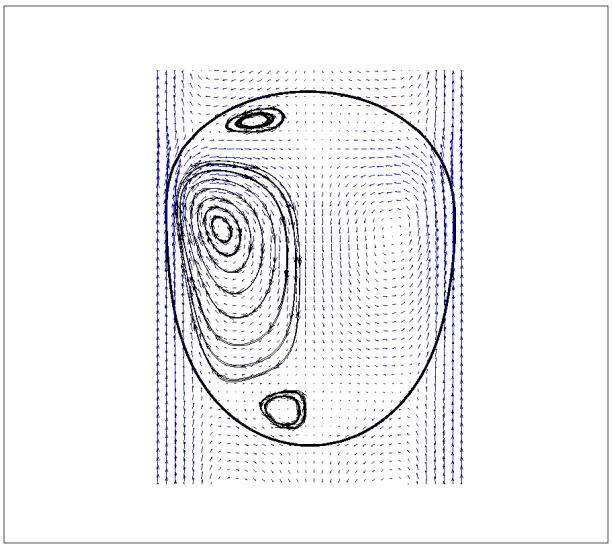


FIG. 8.19 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence hormis r_η qui passe de 2 à 10 (voir texte)

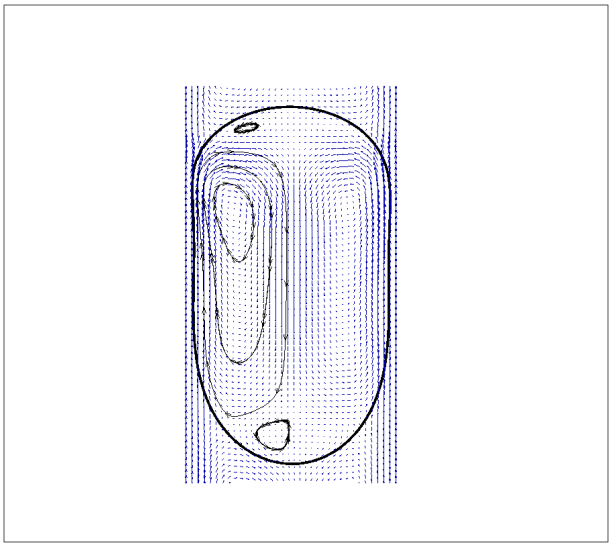


FIG. 8.20 – Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence hormis r_η qui passe de 2 à 10 (voir texte)

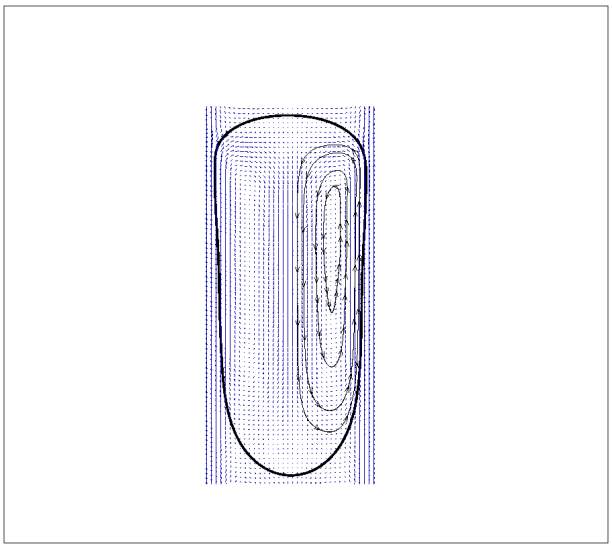


FIG. 8.21 – Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que la goutte a pour longueur $2.5D$

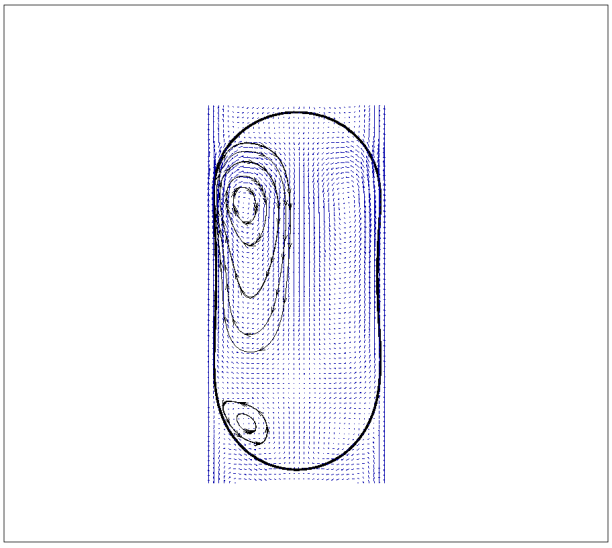


FIG. 8.22 – Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que la goutte a pour longueur $2.5D$ et $u_{in} = 0.02$ m/s

Ainsi, grâce aux nouvelles méthodes numériques utilisées dans ce travail, nous avons obtenu des simulations numériques rapides et précises qui sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Nous avons retrouvé numériquement les phénomènes de zones mortes à l'avant et à l'arrière des microgouttes et nous avons mis en évidence différents régimes de mélange au sein des gouttes en fonction de divers paramètres que sont, le volume des gouttes, les vitesses d'injection, les contrastes de viscosités ou encore le confinement. Il s'agit, à notre connaissance, des premiers résultats numériques explorant l'ensemble de ces paramètres, présentés dans la littérature. En résumé, si l'on veut que la zone de mélange soit la plus étendue possible au sein de la goutte, on peut agir sur deux leviers : le premier consiste à diminuer r_η, le second vise à diminuer l'influence de la tension de surface.

Les algorithmes utilisés permettent d'explorer la dynamique de mélange au sein des microgouttes. Ils constituent ainsi une aide à la conception de réseaux de microcanaux, dans lesquels le contrôle de l'écoulement, nécessaire aux applications pratiques, est satisfait par les gouttes.

Dans le prochain chapitre, nous allons observer des phénomènes tridimensionnels et les comparer aux dynamiques exhibées à l'instant.

Chapitre 9

Simulations numériques en 3D axisymétrique

Nous allons ici poursuivre notre exploration de la dynamique des gouttes en microcanaux à l'aide d'un autre code qui simule une géométrie cylindrique tridimensionnelle. Nous l'avons développé en adaptant l'approche utilisée pour le simulateur cartésien bidimensionnel.

Après avoir décrit les spécificités du modèle utilisé et de sa discrétisation, nous présenterons les résultats concernant la dynamique de mélange dans des gouttes de forme asymptotique puis nous verrons que des simulations réalistes de création de gouttes peuvent être calculées.

9.1 Modèle et discrétisations

Dans ce chapitre, nous allons considérer un modèle de Navier-Stokes pour des écoulements incompressibles (*cf.* chapitre 5) :

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right) - \nabla.(2\eta D\mathbf{u}) + \nabla p = \sigma\kappa\delta(\phi)\mathbf{n} \quad \forall(t,\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \tag{9.1}$$

$$\nabla.\mathbf{u} = 0 \quad \forall(t,\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \tag{9.2}$$

couplé à l'équation *Level Set* :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\phi = 0 \quad \forall(t,\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \tag{9.3}$$

De plus, nous souhaitons prendre en compte des obstacles solides présents au sein de l'écoulement (*cf.* Figure 9.1). Pour cela, nous utilisons une méthode de pénalisation justifiée dans l'article d'Angot *et al.* [9] dont la philosophie remonte notamment aux travaux de Peskin [119]. Elle consiste à rajouter, dans le membre de gauche de (9.1), le terme suivant :

$$\frac{1}{\pi} 1_{\Omega_s} \mathbf{u} \tag{9.4}$$

qui pénalise la vitesse dans le solide Ω_s caractérisé par sa fonction indicatrice 1_{Ω_s} :

$$1_{\Omega_s}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_s \\ 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega \setminus \Omega_s \end{cases} \tag{9.5}$$

La valeur du paramètre de pénalisation π est choisie suffisament faible, de manière à ce que la vitesse calculée dans l'obstacle soit négligeable comparativement à celle du fluide. Il convient

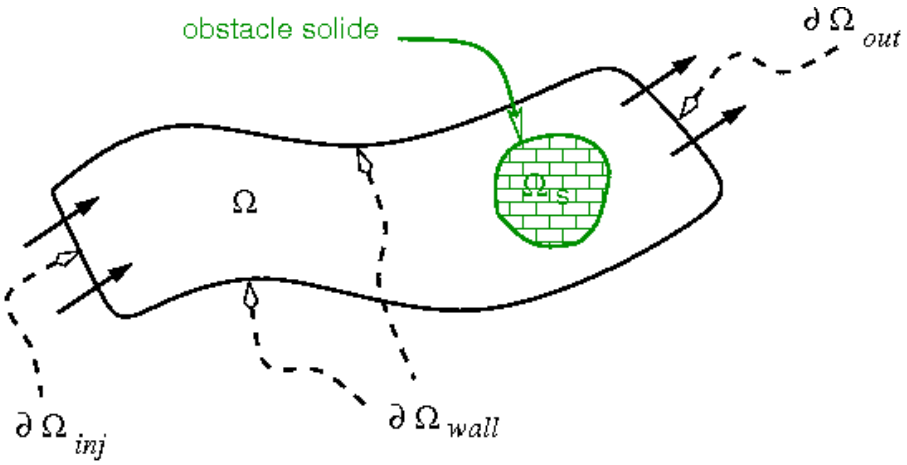


FIG. 9.1 – Le domaine de calcul Ω peut contenir des obstacles solides Ω_s, qui sont alors traités à l'aide d'une méthode de pénalisation.

de rappeler que, dans ce contexte, la condition sur le bord solide de Ω_s est de type Dirichlet homogène (donc différente de la condition de type Robin appliquée sur les parois du canal et présentée au chapitre 5).

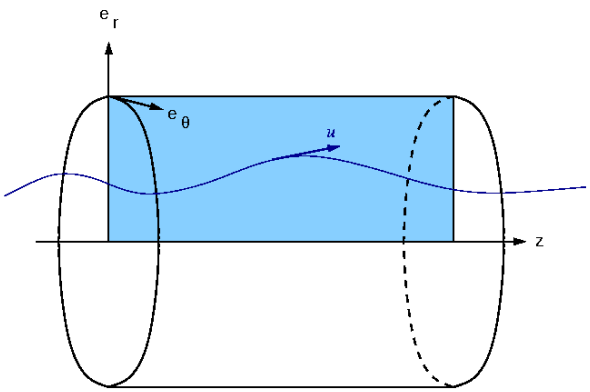


FIG. 9.2 – Géométrie axisymétrique. L'écoulement étant invariant par rotation autour de l'axe z, il suffit de considérer un plan (r, z) dans lequel on a représenté une ligne de courant et un vecteur vitesse caractérisé par deux composantes (u_r, u_z).

Qui plus est, nous allons supposer une configuration d'écoulement tridimensionnelle axisymétrique. Il est alors naturel de reformuler (9.1)-(9.2)-(9.3) en coordonnées cylindriques (r, z) (puisque par hypothèse, les entités liées à la variable angulaire θ n'interviennent plus dans les équations). Suivant l'usage classique, la vitesse $\mathbf{u}$ se réduit à deux composantes notées (u_r, u_z).

En tenant compte du terme de pénalisation, il vient :

$$\rho\left(\frac{\partial u_r}{\partial t}+u_r\frac{\partial u_r}{\partial r}+u_z\frac{\partial u_r}{\partial z}\right) = -\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial r}\left(2\eta\frac{\partial u_r}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\eta\left[\frac{\partial u_r}{\partial z}+\frac{\partial u_z}{\partial r}\right]\right) + \frac{2\eta}{r}\left(\frac{\partial u_r}{\partial r}-\frac{u_r}{r}\right)+\sigma\kappa\frac{\partial H(\phi)}{\partial r}-\frac{1}{\pi}1_{\Omega_s}u_r \tag{9.6}$$

$$\rho\left(\frac{\partial u_z}{\partial t}+u_r\frac{\partial u_z}{\partial r}+u_z\frac{\partial u_z}{\partial z}\right) = -\frac{\partial p}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial z}\left(2\eta\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial r}\left(\eta\left[\frac{\partial u_r}{\partial z}+\frac{\partial u_z}{\partial r}\right]\right) + \frac{\eta}{r}\left(\frac{\partial u_r}{\partial z}+\frac{\partial u_z}{\partial r}\right)+\sigma\kappa\frac{\partial H(\phi)}{\partial z}-\frac{1}{\pi}1_{\Omega_s}u_z \tag{9.7}$$

$$\frac{\partial u_r}{\partial r}+\frac{u_r}{r}+\frac{\partial u_z}{\partial z}=0 \tag{9.8}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}+u_r\frac{\partial \phi}{\partial r}+u_z\frac{\partial \phi}{\partial z}=0 \tag{9.9}$$

Dans la suite, nous noterons $u := u_r$, $v := u_z$ et $1_S := 1_{\Omega_s}$, pour alléger les notations.

L'utilisation de ce modèle est motivée par le désir d'étudier :

- d'une part, la différence entre les hydrodynamiques 2D et 3D avec l'hypothèse d'axisymétrie ;
- d'autre part, l'influence des longueurs de glissement dans la condition de Navier à la paroi ; pour cela, on pourra notamment effectuer des comparaisons quantitatives avec les expériences physiques effectuées dans des capillaires cylindriques (ce que n'autorisait pas le code 2D) ;
- enfin, l'influence de l'inertie lors des changements topologiques, en particulier, lors de la création de gouttes.

Les deux premiers points sont abordés à la section suivante. Le troisième constitue une perspective à très court terme.

Nous allons pour cela considérer deux types de géométrie. La première est celle d'un cylindre unique au sein duquel se déplace une goutte (ou plusieurs) dont nous voulons déterminer numériquement l'état asymptotique (*cf.* Figure 9.3). Ce type de calcul sera comparé à ceux

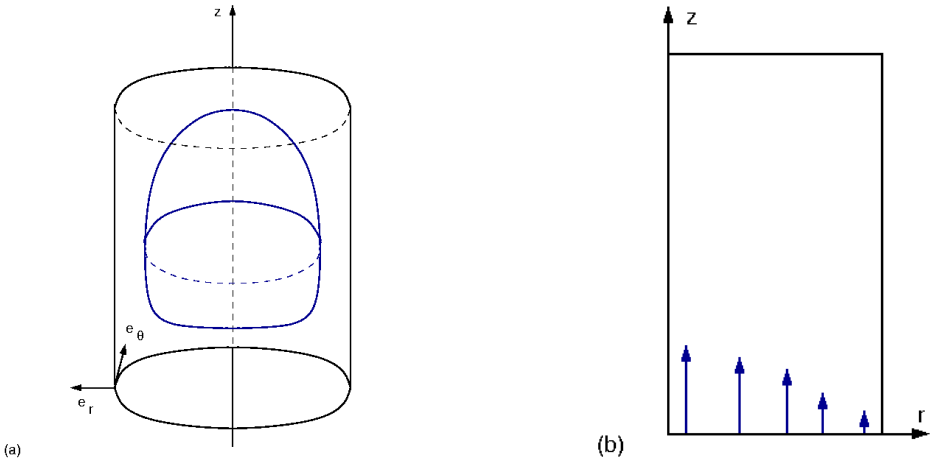


FIG. 9.3 – Goutte dans un canal cylindrique : (a) géométrie réelle et (b) domaine de calcul utilisé.

du chapitre précédent, de manière à saisir l'influence des effets 3D sur la dynamique.
La seconde vise à reproduire la configuration où deux cylindres coaxiaux permettent d'injecter un fluide au centre d'un autre (*cf.* Figure 9.4) : on peut alors étudier la dynamique de jets, la formation de gouttes et l'influence des termes d'inertie.

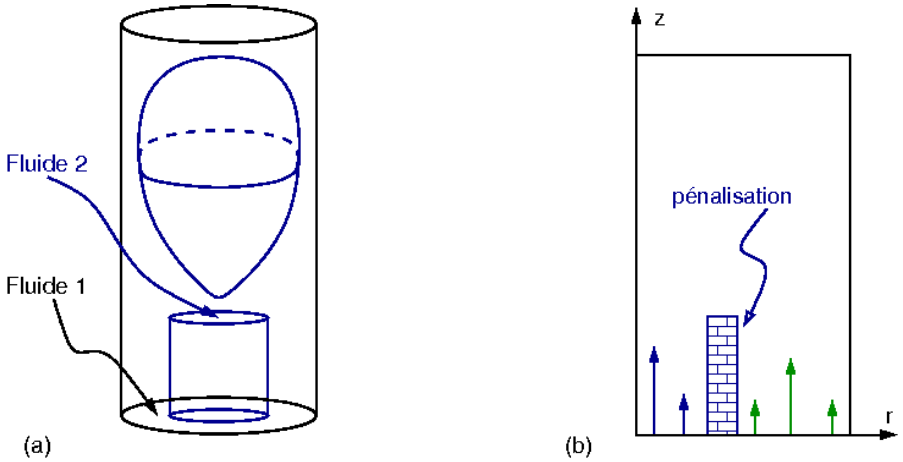


FIG. 9.4 – Création de goutte avec deux canaux cylindriques coaxiaux : (a) géométrie réelle et (b) domaine de calcul utilisé.

Pour résoudre le problème (9.6)-(9.7)-(9.8), on utilise la même méthode de Lagrangien Augmenté que celle détaillée au chapitre 5, en traitant le terme de pénalisation de manière implicite dans la discrétisation en temps. Dans le cas présent, la méthode itérative consiste à résoudre le système suivant en $U_{k+1} = (u_{k+1}, v_{k+1})$, sachant que (u^n, v^n) et p_k sont connus :

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\rho r}{\Delta t} + \frac{r}{\pi} 1_S\right) u_{k+1} - r\frac{\partial}{\partial r}\left(2\eta \frac{\partial u_{k+1}}{\partial r}\right) - r\frac{\partial}{\partial z}\left(\eta\left[\frac{\partial u_{k+1}}{\partial z} + \frac{\partial v_{k+1}}{\partial r}\right]\right) \\
&- 2\eta\left(\frac{\partial u_{k+1}}{\partial r} - \frac{u_{k+1}}{r}\right) - c_1 r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial u_{k+1}}{\partial r} + \frac{u_{k+1}}{r} + \frac{\partial v_{k+1}}{\partial z}\right) \\
&= -\rho r u^n \frac{\partial u^n}{\partial r} - \rho r v^n \frac{\partial u^n}{\partial z} + r\sigma\kappa^n \frac{\partial H(\phi^n)}{\partial r} + \frac{\rho r}{\Delta t} u^n - r\frac{\partial p_k}{\partial r} \qquad (9.10) \\
&\left(\frac{\rho r}{\Delta t} + \frac{r}{\pi} 1_S\right) v_{k+1} - r\frac{\partial}{\partial z}\left(2\eta \frac{\partial v_{k+1}}{\partial z}\right) - r\frac{\partial}{\partial r}\left(\eta\left[\frac{\partial u_{k+1}}{\partial z} + \frac{\partial v_{k+1}}{\partial r}\right]\right) \\
&- \eta\left(\frac{\partial u_{k+1}}{\partial z} + \frac{\partial v_{k+1}}{\partial r}\right) - c_1 r\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial u_{k+1}}{\partial r} + \frac{u_{k+1}}{r} + \frac{\partial v_{k+1}}{\partial z}\right) \\
&= -\rho r u^n \frac{\partial v^n}{\partial r} - \rho r v^n \frac{\partial v^n}{\partial z} + r\sigma\kappa^n \frac{\partial H(\phi^n)}{\partial z} + \frac{\rho r}{\Delta t} v^n - r\frac{\partial p_k}{\partial z} \qquad (9.11)
\end{aligned}$$

puis à réactualiser la pression *via* :

$$p_{k+1} = p_k - c_2 \nabla . U_{k+1} \qquad (9.12)$$

La discrétisation en espace est aussi réalisée comme au chapitre 5. Le maillage est identique en remplaçant les notations $\mathbf{x}_{i,j} := (x_i, y_j)$ par $\mathbf{x}_{i,j} := (r_i, z_j) = ((i-1/2)\Delta r; (j-1/2)\Delta z)$; $i = 1...nr, j = 1...nz$.
Outre les variables auxiliaires définies au chapitre 5, on introduit en plus les variables d'abscisse $r_i^u = (i-1)\Delta r$; $i = 1...nr$ et $r_i^v = r_i$, induites par le maillage décalé en vitesse. Enfin, lors des

intégrations sur les volumes de contrôles respectifs de u et v, on utilise la première composante de la normale associée à ϕ évaluée au point $\mathbf{x}_{i-1/2,j}$, notée donc $n_{i,j}^{\phi,u,r}$, ainsi que la première composante de la normale associée à ϕ évaluée au point $\mathbf{x}_{i,j-1/2}$, notée donc $n_{i,j}^{\phi,v,r}$. Pour les déterminer, on procède de la manière suivante :

1. Calcul de $\tilde{\phi}_{i,j}$ avec (5.37)

2. Calcul de $\mathbf{n}^u = (n^{\phi,u,r}; n^{\phi,u,z})$ au point $\mathbf{x}_{i-1/2,j}$:

$$n_{i,j}^{\phi,u,r} = \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\Delta r} \qquad n_{i,j}^{\phi,u,z} = \frac{\tilde{\phi}_{i,j+1} - \tilde{\phi}_{i,j}}{\Delta z} \qquad \text{puis normalisation} \tag{9.13}$$

3. Calcul de $\mathbf{n}^v = (n^{\phi,v,r}; n^{\phi,v,z})$ au point $\mathbf{x}_{i,j-1/2}$:

$$n_{i,j}^{\phi,v,r} = \frac{\tilde{\phi}_{i+1,j} - \tilde{\phi}_{i,j}}{\Delta r} \qquad n_{i,j}^{\phi,v,z} = \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}{\Delta z} \qquad \text{puis normalisation} \tag{9.14}$$

Nous donnons directement les équations induisant le système linéaire à résoudre dans la méthode de Lagrangien Augmenté (qui sont les homologues des équations (5.27)-(5.28)-(5.29) dans le repère cartésien) :

$$\begin{aligned}
&\Delta r\,\Delta z\; r_i^u \left(\frac{\rho_{i,j}^u}{\Delta t} + \frac{1_{S\mathcal{V}_c^u(i,j)}}{\pi}\right) u_{i,j}^{k+1} - \frac{2\Delta z}{\Delta r}\; r_i^u \left[\eta_{i,j}\,\left(u_{i+1,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k+1}\right) \;-\; \eta_{i-1,j}\,\left(u_{i,j}^{k+1} - u_{i-1,j}^{k+1}\right)\right] \\
&-\Delta r\; r_i^u \left[\tilde{\eta}_{i,j+1}^u \left(\frac{u_{i,j+1}^{k+1} - u_{i,j}^{k+1}}{\Delta z} \;+\; \frac{v_{i,j+1}^{k+1} - v_{i-1,j+1}^{k+1}}{\Delta r}\right) - \tilde{\eta}_{i,j}^u \left(\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j-1}^{k+1}}{\Delta z} \;+\; \frac{v_{i,j}^{k+1} - v_{i-1,j}^{k+1}}{\Delta r}\right)\right] \\
&\qquad - 2\eta^u{}_{i,j}\,\Delta z\,\left[\frac{u_{i+1,j}^{k+1} - u_{i-1,j}^{k+1}}{2} \;-\; \Delta r\,\frac{u_{i,j}^{k+1}}{r_i^u}\right] \\
&\quad -\; c_1\, r_i^u\,\Delta z \left(\frac{u_{i+1,j}^{k+1} - 2u_{i,j}^{k+1} + u_{i-1,j}^{k+1}}{\Delta r} \;+\; \frac{1}{2}\left[\frac{u_{i,j}^{k+1} + u_{i+1,j}^{k+1}}{r_i} \;-\; \frac{u_{i-1,j}^{k+1} + u_{i,j}^{k+1}}{r_{i-1}}\right]\right. \\
&\qquad \left. + \frac{v_{i,j+1}^{k+1} - v_{i,j}^{k+1} - (v_{i-1,j+1}^{k+1} - v_{i-1,j}^{k+1})}{\Delta z}\right) \;= \\
&-\;\Delta r\,\Delta z\; r_i^u\,\rho_{i,j}^u\,u_{i,j}^n \left[\frac{\partial u^n}{\partial r}\right]_{i,j}^{\text{upwd}} \;-\; \Delta r\,\Delta z\; r_i^u\,\rho_{i,j}^u\,\frac{v_{i,j}^n + v_{i,j+1}^n + v_{i-1,j+1}^n + v_{i-1,j}^n}{4}\left[\frac{\partial u^n}{\partial z}\right]_{i,j}^{\text{upwd}} \\
&+\sigma\, r_i^u\;\frac{1}{\Delta r\,\Delta z}\left[\left(n_{i,j}^{\phi,r} - n_{i-1,j}^{\phi,r}\right)\Delta z + \Delta r\,\Delta z\frac{n_{i,j}^{\phi,u,r}}{r_i^u} + \left(\tilde{n}_{i,j+1}^{\phi,z} - \tilde{n}_{i,j}^{\phi,z}\right)\Delta r\right]\;\Delta z\;\left(H(\phi_{i,j}^n) - H(\phi_{i-1,j}^n)\right) \\
&\qquad\qquad + \;\Delta r\,\Delta z\; r_i^u\,\frac{\rho_{i,j}^u}{\Delta t}\,u_{i,j}^n \;-\; \Delta z\, r_i^u (p_{i,j}^k - p_{i-1,j}^k)
\end{aligned} \tag{9.15}$$

$$\Delta r\,\Delta z\; r_i^v \left(\frac{\rho_{i,j}^v}{\Delta t} + \frac{1_{S\mathcal{V}_c^v(i,j)}}{\pi}\right) v_{i,j}^{k+1} - \frac{2\Delta r}{\Delta z}\; r_i^v \left[\eta_{i,j}\left(v_{i,j+1}^{k+1} - v_{i,j}^{k+1}\right) - \eta_{i,j-1}\left(v_{i,j}^{k+1} - v_{i,j-1}^{k+1}\right)\right]$$
$$-\Delta z\; r_i^v \left[\tilde{\eta}_{i+1,j}^v \left(\frac{u_{i+1,j}^{k+1} - u_{i+1,j-1}^{k+1}}{\Delta z} + \frac{v_{i+1,j}^{k+1} - v_{i,j}^{k+1}}{\Delta r}\right) - \tilde{\eta}_{i,j}^v \left(\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j-1}^{k+1}}{\Delta z} + \frac{v_{i,j}^{k+1} - v_{i-1,j}^{k+1}}{\Delta r}\right)\right]$$
$$- \eta^v{}_{i,j} \left[\frac{\Delta r}{2}\left(u_{i,j}^{k+1} + u_{i+1,j}^{k+1} - u_{i,j-1}^{k+1} - u_{i+1,j-1}^{k+1}\right) + \frac{\Delta z}{2}\left(v_{i+1,j}^{k+1} - v_{i-1,j}^{k+1}\right)\right]$$
$$- c_1\, r_i^v\, \Delta r \left(\frac{u_{i+1,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k+1} - (u_{i+1,j-1}^{k+1} - u_{i,j-1}^{k+1})}{\Delta r} + \frac{1}{2}\left[\frac{u_{i,j}^{k+1} + u_{i+1,j}^{k+1}}{r_i} - \frac{u_{i,j-1}^{k+1} + u_{i+1,j-1}^{k+1}}{r_i}\right]\right.$$
$$\left. + \frac{v_{i,j+1}^{k+1} - 2v_{i,j}^{k+1} + v_{i,j-1}^{k+1}}{\Delta z}\right) =$$
$$- \Delta r\,\Delta z\; r_i^v\, \rho_{i,j}^v\, \frac{u_{i,j}^n + u_{i+1,j}^n + u_{i+1,j-1}^n + u_{i,j-1}^n}{4} \left[\frac{\partial v^n}{\partial r}\right]_{i,j}^{\text{upwd}} - \Delta r\,\Delta z\; r_i^v\, \rho_{i,j}^v\, v_{i,j}^n \left[\frac{\partial v^n}{\partial z}\right]_{i,j}^{\text{upwd}}$$
$$+ \sigma\, r_i^v\, \frac{1}{\Delta r\,\Delta z}\left[\left(\tilde{n}_{i+1,j}^{\phi,r} - \tilde{n}_{i,j}^{\phi,r}\right)\Delta z + \Delta r\,\Delta z \frac{n_{i,j}^{\phi,v,r}}{r_i^v} + \left(n_{i,j}^{\phi,z} - n_{i,j-1}^{\phi,z}\right)\Delta r\right]\; \Delta r\,\left(H(\phi_{i,j}^n) - H(\phi_{i,j-1}^n)\right)$$
$$+\; \Delta r\,\Delta z\; r_i^v\, \frac{\rho_{i,j}^v}{\Delta t}\, v_{i,j}^n \;-\; \Delta r\, r_i^v (p_{i,j}^k - p_{i,j-1}^k) \quad (9.16)$$

$$p_{i,j}^{k+1} = p_{i,j}^k - r_2 \left(\frac{u_{i+1,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k+1}}{\Delta r} + \frac{u_{i,j}^{k+1} + u_{i+1,j}^{k+1}}{2r_i} + \frac{v_{i,j+1}^{k+1} - v_{i,j}^{k+1}}{\Delta z}\right) \quad (9.17)$$

De par le caractère axisymétrique de ces domaines de calcul, les *conditions aux limites* en vitesse sont légèrement modifiées par rapport à celles présentées dans le chapitre 5. En effet, le bord vertical gauche dans les Figures 9.3 et 9.4, *i.e.* l'axe $r = 0$, est un bord fluide d'un type différent des faces d'injection et de sortie. Les conditions aux limites sur l'axe $r = 0$ sont données par l'hypothèse d'axisymétrie : la vitesse $\mathbf{u}$ au point $(-r, z)$ se déduit de la vitesse $\mathbf{u} = (u, v)$ au point (r, z) par :

$$\mathbf{u}(-r, z) = (-u, v) \quad \forall (r, z) \in \Omega \quad (9.18)$$

En particulier, pour les mailles en u dont le centre (r_1^u, z_j), $j = 1...nz$ est sur l'axe $r = 0$, on a $u_{1,j} = 0$. Et de manière générale, on tient compte de la symétrie lors du calcul des quantités liées à ce côté.
Pour les trois autres bords : les conditions d'injection et de sortie sont de type Poiseuille alors que le glissement est pris en compte sur la paroi solide de Ω, en suivant l'approche du chapitre 5.

Mutatis mutandis, nous avons développé un second code de calcul complet, à l'image de celui présenté au chapitre précédent et permettant de simuler une dynamique 3D axisymétrique. L'intérêt de ce modèle numérique est que nos collègues du LOF ont conduit des expériences physiques dans ce même type de configuration cylindrique.

9.2 Régimes de mélange

Dans cette section, nous présentons les homologues axisymétriques des simulations du chapitre 8 qui illustrent la dynamique de mélange au sein des microgouttes.
Nous considérons donc un domaine de calcul de rayon 60 μm au sein duquel on plonge deux gouttes, l'une qualifiée de "petite", l'autre de "grande", telles que leur rapport de longueurs est d'environ 1.4. Nous utilisons les mêmes "données de référence". La vitesse d'injection dans le canal est $u_{in} = 0.2$ m/s. La viscosité de la goutte vaut 2.10^{-2} $kg/(ms)$ et celle de la phase continue vaut 4.10^{-2} $kg/(ms)$. Les densités des deux fluides sont affectées de la même valeur $\rho_1 = \rho_2 = 1000\ kg/m^3$. Le coefficient de tension de surface vaut $\sigma = 3.10^{-2}$ N/m. Nous avons de plus utilisé 20 mailles pour discrétiser la section du canal pour toutes les simulations. Dans la suite, les gouttes se déplacent de bas en haut. Nous rappellons, de plus, que sont présentés les états où les interfaces ont atteint une forme stationnaire et se translatent dans un canal droit.

La Figure 9.5 montre le champ de vitesse dans le référentiel de la petite goutte et quelques lignes de courants associées, pour les données de référence. En comparant avec la Figure 8.10 (page 160), on constate que la dynamique globale est relativement similaire :
- la zone de recirculation centrale occupe la majorité de la goutte ;
- une zone morte est présente à l'avant.

Cependant, il convient de noter que la zone morte à l'arrière de la goutte est clairement plus réduite dans la configuration axisymétrique, comparativement à la simulation cartésienne bidimensionnelle. Ceci est encore plus visible pour la grande goutte de la Figure 9.6 (à comparer avec la Figure 8.11).

De plus, remarquons que cette modification de la dynamique est essentiellement due aux effets tridimensionnels puisque, lorsque l'on impose $\rho = 0$ dans une simulation, on obtient le même état asymptotique comme le montrent les Figures 9.9 et 9.12. Les termes supplémentaires présents (instationnarité et inertie) dans le modèle de Navier-Stokes, vis à vis de l'équation de Stokes, jouent donc naturellement un rôle négligeable dans ces configurations où l'on détermine les états asymptotiques des microgouttes.

La dynamique de mélange pour la grande goutte est présentée sur la Figure 9.8, dans le cas de la variante plus lente $u_{in} = 0.1$ m/s. La tension de surface induit toujours le même effet de bombage de l'interface. La comparaison avec la Figure 8.16, pour étudier les variations entre les caractéristiques 2D et 3D, induit les mêmes commentaires que pour la petite goutte. De plus, il ressort qu'en géométrie cylindrique, lorsque la vitesse diminue, les zones mortes sont comprimées au profit de la zone centrale. Ceci est d'autant plus marqué pour la zone frontale comme l'illustrent les Figures 9.5, 9.7 et 9.9. De ce point de vue, la dynamique axisymétrique est donc complètement opposée à celle observée en 2D.

Lorsque l'on échange les viscosités des deux fluides, la goutte se contracte devenant moins longue donc plus large (par conservation de la masse) et la zone de recirculation à l'avant se renforce aux dépens de la zone de mélange centrale, comme le montre la Figure 9.10.
L'influence d'une augmentation du contraste des viscosités est présentée sur la Figure 9.11 où r_η passe de 2 à 10, comparativement à la petite goutte de référence (Fig 9.5). Il apparaît que la goutte se contracte et que la recirculation centrale gagne du terrain tant à l'arrière qu'à l'avant ; ce qui, une nouvelle fois, est l'inverse des simulations bidimensionnelles puisque la zone de mélange est étendue lorsque r_η croît.

Ensuite, nous avons réalisé une série de simulations pour étudier l'influence de la longueur de glissement (notamment évoquée en pages 103-104 et 142) sur la dynamique à l'intérieur de la goutte. Pour cela, nous avons utilisé les données de référence relatives à la petite goutte et nous avons fait varier la valeur de f (*cf.* équation (5.19), page 104). Il convient de noter que dans toutes les simulations précédentes, on a pris $f = 0.1$. Les Figures 9.13 - 9.14 - 9.15 - 9.16 ont été obtenues en prenant respectivement les valeurs de $f = \{4.10^{-2}\,;\, 10^{-2}\,;\, 5.10^{-3}\,;\, 10^{-3}\}$. On constate que, même si les différences ne sont pas drastiques, la modification sensible des lignes de courant entre les deux valeurs extrêmes de f testées suggère qu'il faudra être prudent lors d'une comparaison quantitative avec les expériences physiques. En particulier, il pourra être nécessaire de réaliser des tests de calibration si l'on ne connaît pas précisément la valeur du coefficient de glissement physique à imposer dans les simulations.

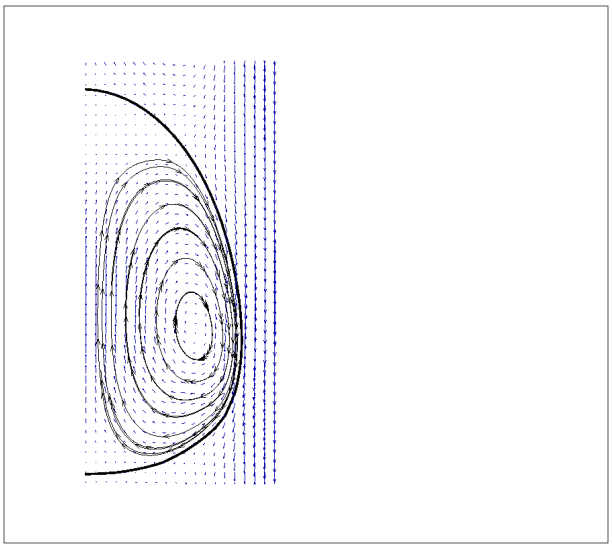


FIG. 9.5 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence

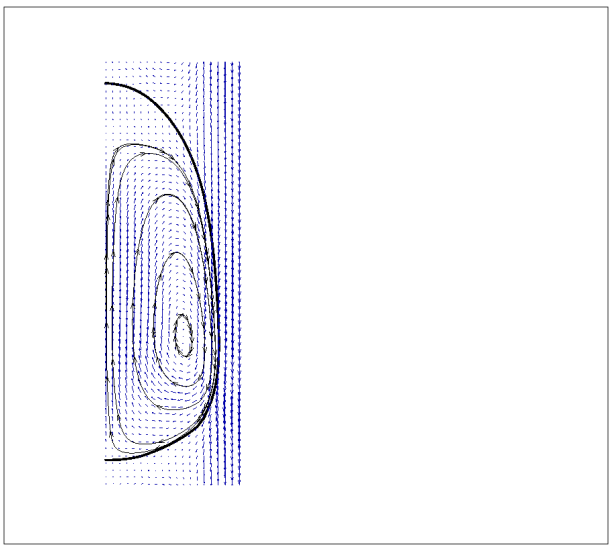


FIG. 9.6 – Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence

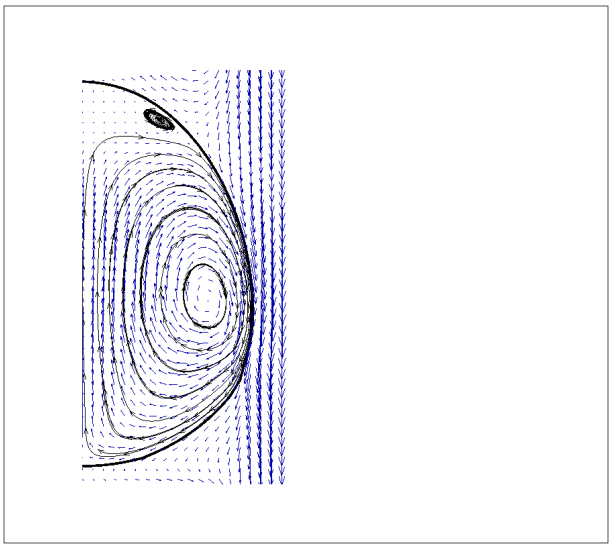


FIG. 9.7 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.1$ m/s

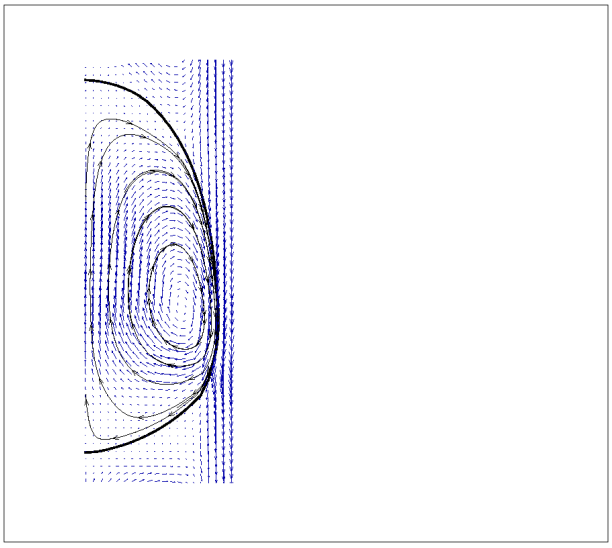


FIG. 9.8 – Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.1$ m/s

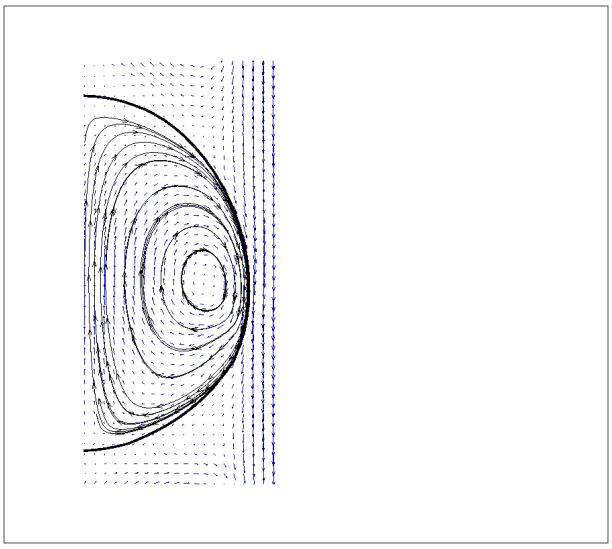


FIG. 9.9 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.05$ m/s

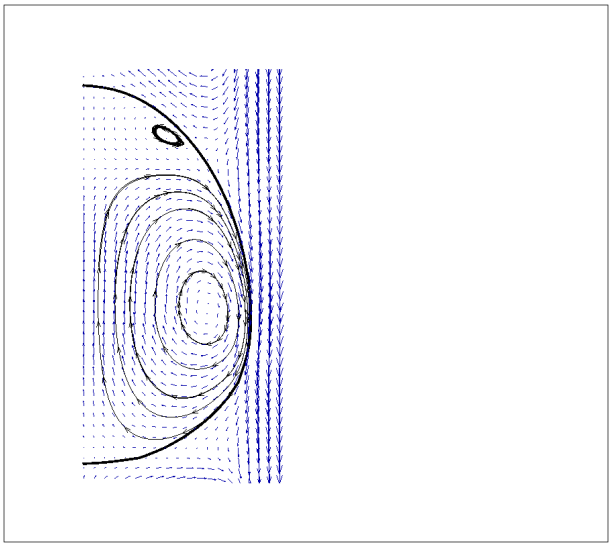


FIG. 9.10 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que les viscosités dans la goutte et de la phase continue sont échangées.

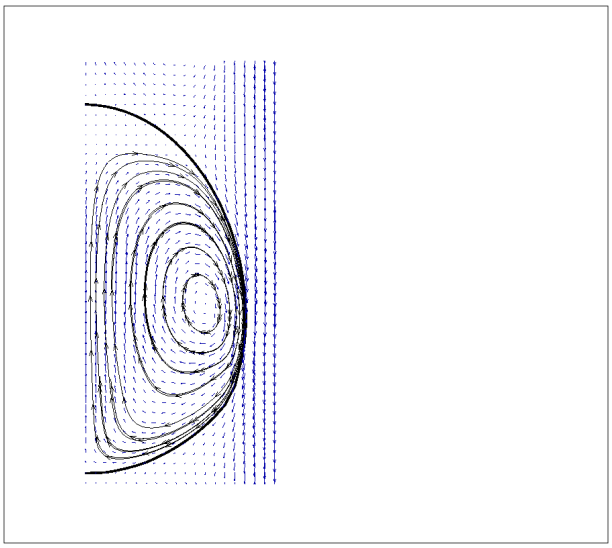


FIG. 9.11 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence hormis r_η qui passe de 2 à 10 (voir texte).

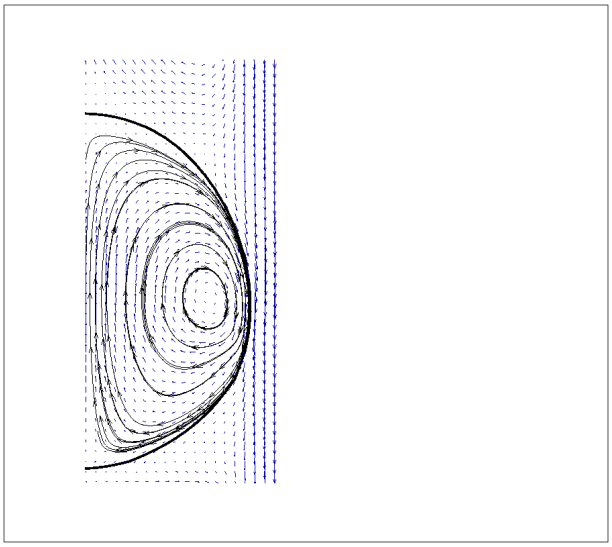


FIG. 9.12 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.05$ m/s et $\rho_1 = \rho_2 = 0$. A comparer à la Figure 9.9 pour constater que l'inertie est négligeable dans ces configurations asymptotiques.

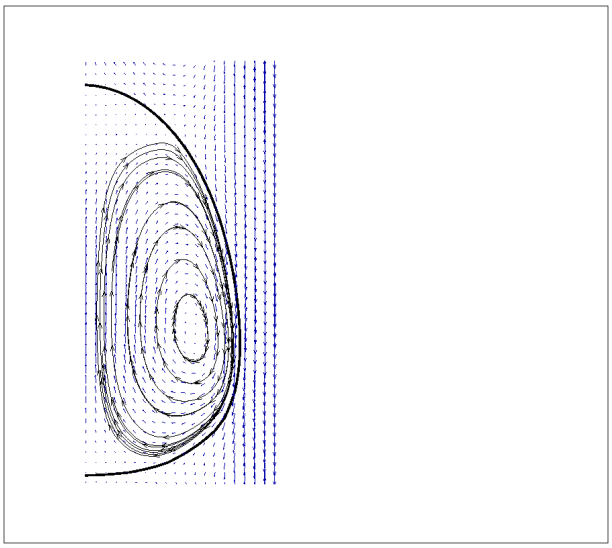


FIG. 9.13 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $f = 4.10^{-2}$.

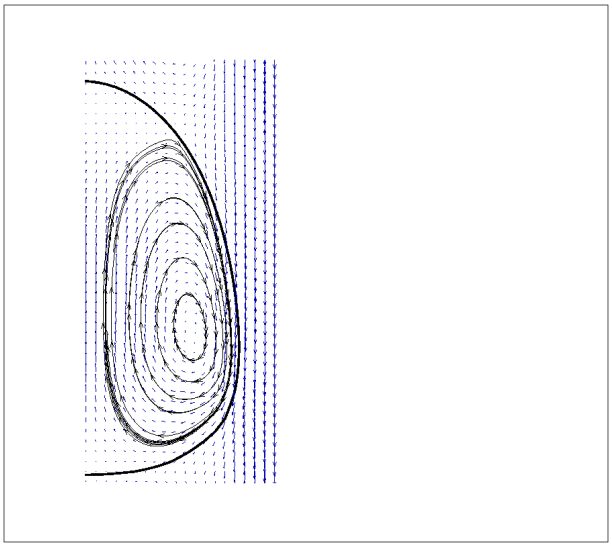


FIG. 9.14 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $f = 10^{-2}$.

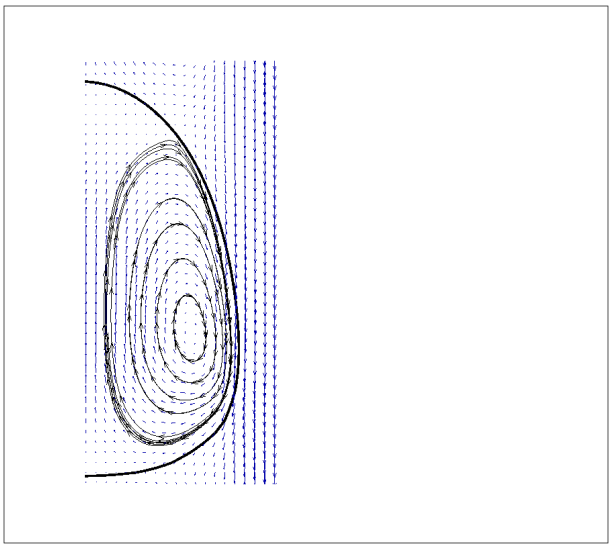


FIG. 9.15 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $f = 5.10^{-3}$

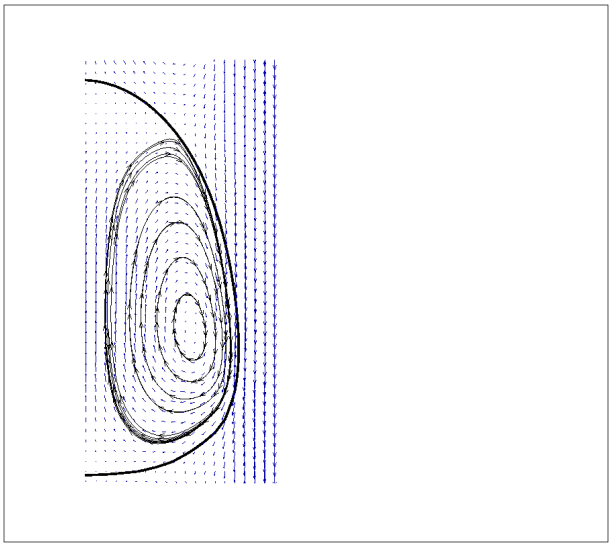


FIG. 9.16 – Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $f = 10^{-3}$

9.3 Création de gouttes

Nous présentons maintenant les résultats obtenus dans la géométrie de la Figure 9.4, qui permet d'étudier la destabilisation d'un jet microfluidique et la création de gouttes.

Plus précisément, nous considerons un canal externe de rayon $R_c = 300\mu m$ et de longueur $4R_c$. Par pénalisation, nous simulons un injecteur d'épaisseur $50\mu m$, de longueur R_c et centré en $r = 75\mu m$ (*cf.* Figures 9.17 et 9.18). Les fluides en présence ont une tension de surface égale à $33.10^{-3}\ N/m$. La phase continue, apportée par le canal externe, a une viscosité de $303.10^{-3}\ Pa.s$ alors que la phase du jet a une viscosité de $55.10^{-3}\ Pa.s$. Les densités des deux fluides sont affectées de la même valeur $\rho_1 = \rho_2 = 1000\ kg/m^3$. Les vitesses maximales des deux profils de Poiseuille imposés à l'entrée sont respectivement $u_1 = 0.071$ m/s dans le jet et $u_1 = 0.010$ m/s dans le canal externe (*cf.* Figure 9.19). On discrétise la section du canal avec 30 mailles.

Les Figures 9.20 à 9.28 montrent le développement d'un jet et la création d'une goutte au cours d'une simulation utilisant les données ci-dessus. On peut noter que la période de création d'une goutte est d'environ 100 ms alors que la dynamique de pincement critique conduisant à la rupture est réalisée en 1 à 2 ms et, en moins de 5 ms, on passe d'un jet pincé à une goutte dont la forme asymptotique se translate dans le canal.

Nous donnons le champ de pression et quelques lignes de courants pour préciser la dynamique lorsque la forme de la goutte créée est stationnaire, en l'occurrence, au temps de référence incrémenté de 4.5 ms (*cf.* Figure 9.27). On constate bien un saut de pression au sein de la goutte, induit par la tension de surface. De plus, une recirculation marquée est présente dans le bout du jet, au niveau de l'injecteur.

Il convient de remarquer que nous avons comparé les films issus de ces simulations avec des films des expériences en microcanaux. Il ressort que dans les mêmes régimes, l'accord qualitatif est excellent. Le code retrouve bien la dynamique de rupture de goutte et les effets dûs à la tension de surface : retour rapide des interfaces vers une forme plus circulaire, phénomène de rétraction et bombement de la forme du jet après rupture. De plus, il semble que la méthode de pénalisation permette de bien prendre en compte la dynamique à l'avant de l'injecteur. Pour illustrer ce type de convergence que l'on observe entre les deux types de films, nous donnons l'une des photos de ces expériences physiques. Les données expérimentales sont légèrement différentes. Le canal externe est de rayon $R_c = 275\mu m$. La viscosité dans le jet est de 55.10^{-3} $Pa.s$ alors que celle de la phase continue est de $235.10^{-3}\ Pa.s$. La tension de surface est évaluée à $24.10^{-3}\ N/m$. Le rayon interne induit par l'injecteur est d'environ $50\mu m$ (i.e. comme dans la simulation). Les vitesses sont d'environ $u_1 = 0.1$ m/s dans le jet et $u_1 = 0.01$ m/s dans le canal externe. Nombre de ces valeurs sont approximatives car déterminées à partir des données extraites des photos pour lesquelles le plan de focalisation n'est pas nécessairement le milieu du canal (on commet donc une approximation dans le calcul des vitesses via les données des débits). De plus, le canal interne est réalisé "à la main" par l'expérimentateur et sa section n'est pas donnée avec une grande précision. Par ailleurs, la tension de surface fournie par les physiciens présente parfois des marges d'erreurs de plusieurs dizaines de pourcent [33]. En conséquence, dans le type de configuration qui nous concerne ici, il est difficile de faire des comparaisons parfaitement quantitatives, du fait de l'incertitude sur les données. Cependant, lorsque les régimes de destabilisation du jet exhibés par les expériences et les simulations sont identiques pour des jeu de données du même ordre, on se propose de comparer les formes d'interfaces obtenues. La Figure 9.30 est une superposition d'une interface simulée

numériquement (courbe bleue) et d'une photo extraite des expériences de Pierre Guillot [66], pour les deux jeux de données évoquées précedemment. Même s'il convient d'être prudent au vu de leurs différences certaines, pondérées par l'incertitude expérimentale, on remarque cependant que le code est arrivé à capter la dynamique géneral de pincement de ce type de jet microfluidique.

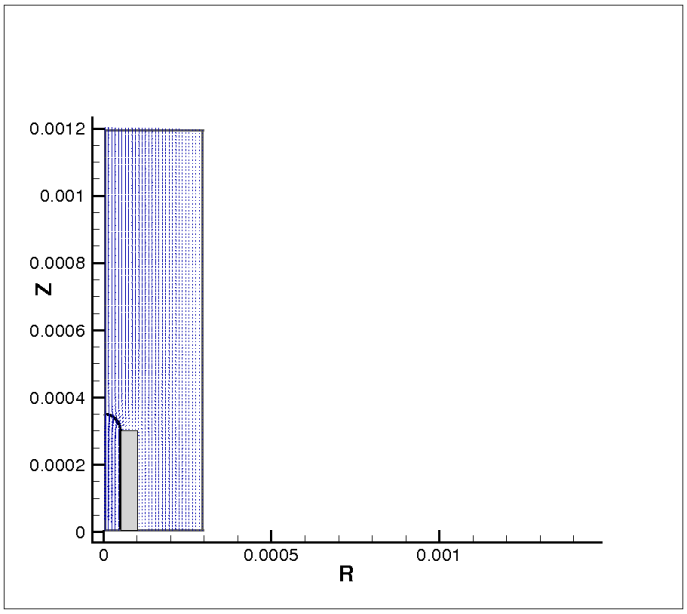


FIG. 9.17 – Géométrie avec un injecteur (rectangle en gris) utilisée pour créer des gouttes. L'interface (en trait noir épais) est représentée avec le champ de vitesse associé (flèches bleues).

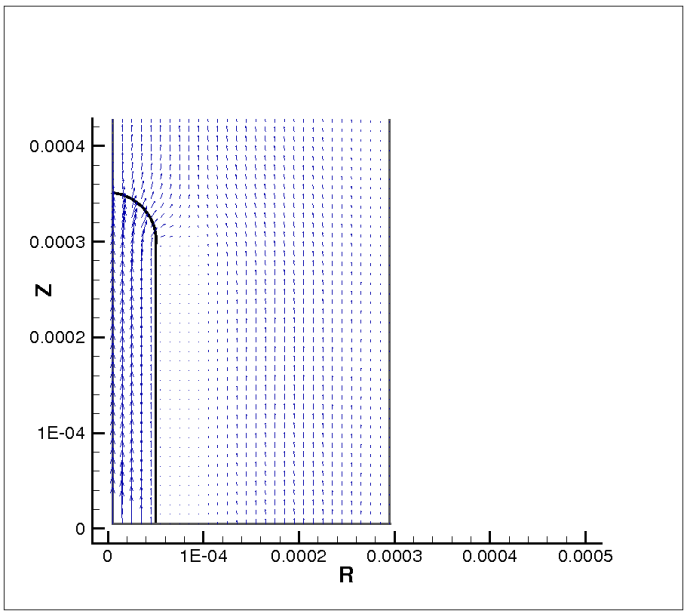


FIG. 9.18 – Zoom sur la zone de l'injecteur de la Figure 9.17. Les vitesses calculées dans le solide, par la méthode de pénalisation sont négligeables par rapport à celle dans le fluide.

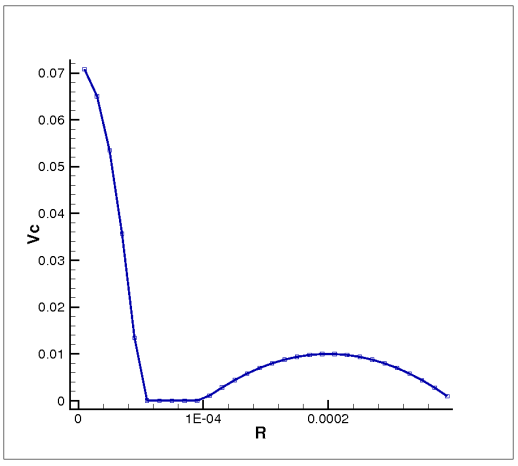


FIG. 9.19 – Double Poiseuille imposé sur le bord d'injection, en $z = 0$. Une vitesse nulle est affectée dans la zone solide correspondant à l'injecteur.

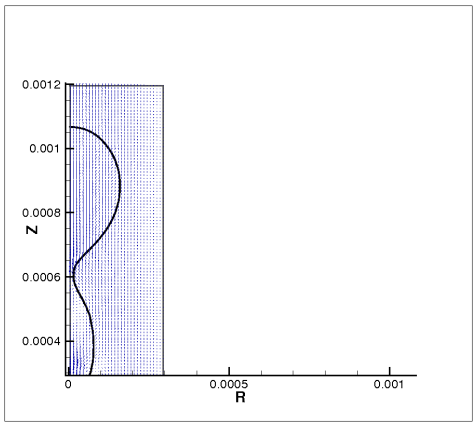


FIG. 9.20 – Développement d'un jet. Temps de référence

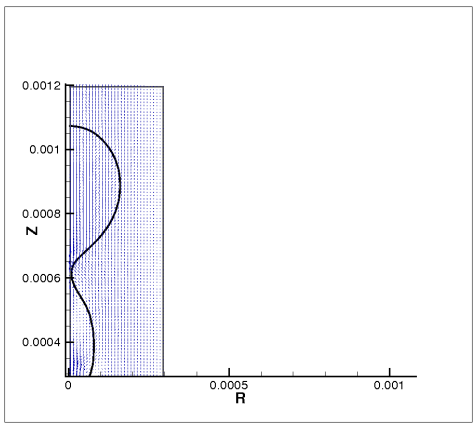


FIG. 9.21 – Développement d'un jet. Temps de référence + 0.5 ms.

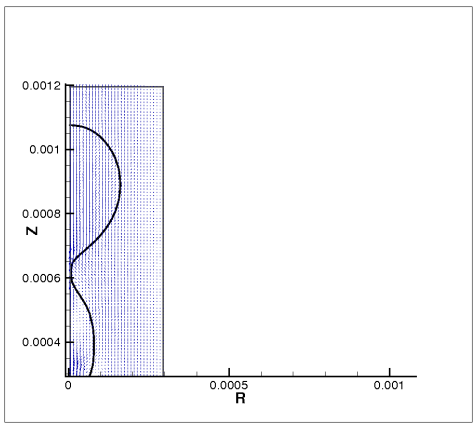


FIG. 9.22 – Développement d'un jet. Temps de référence + 0.8 ms.

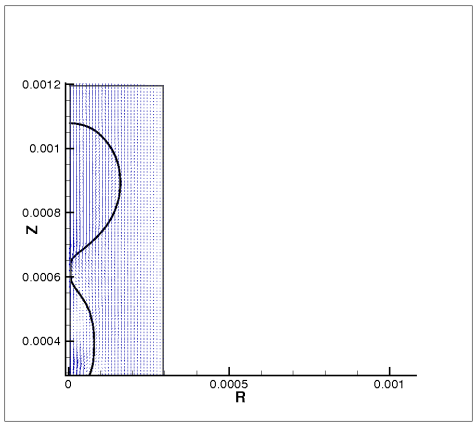


FIG. 9.23 – Développement d'un jet. Temps de référence + 1.1 ms.

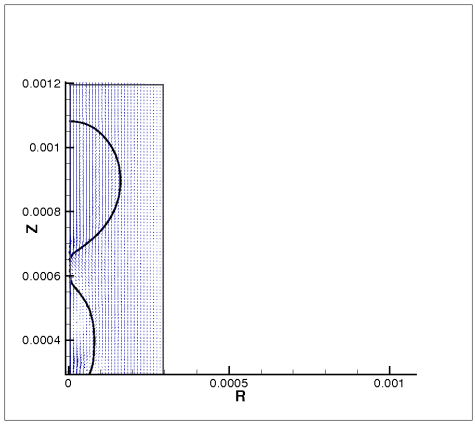


FIG. 9.24 – Développement d'un jet. Temps de référence + 1.3 ms. Rupture du jet et création de la goutte entre les Figures 9.23 et 9.24.

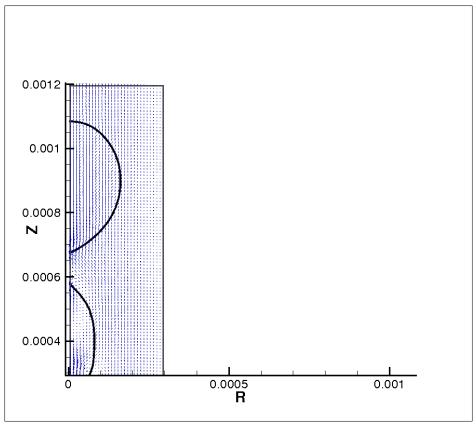


FIG. 9.25 – Développement d'un jet. Temps de référence + 1.6 ms.

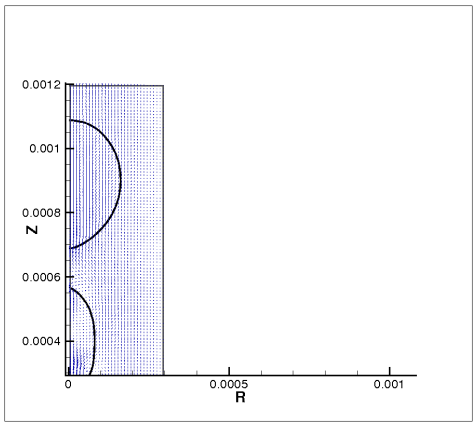


FIG. 9.26 – Développement d'un jet. Temps de référence + 1.9 ms.

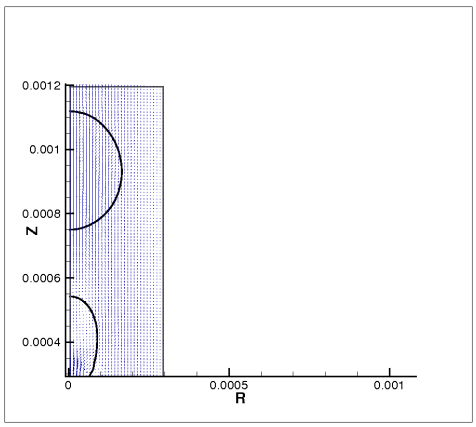


FIG. 9.27 – Développement d'un jet. Temps de référence + 4.5 ms.

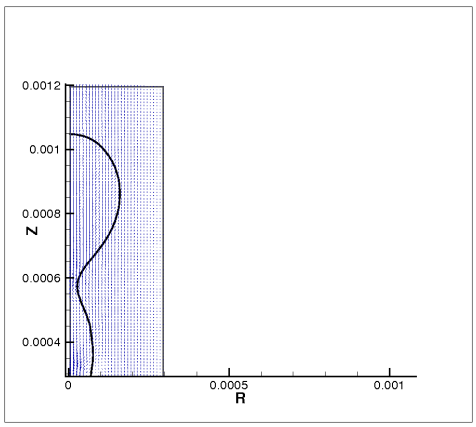


FIG. 9.28 – Développement d'un jet. Temps de référence + 98 ms.

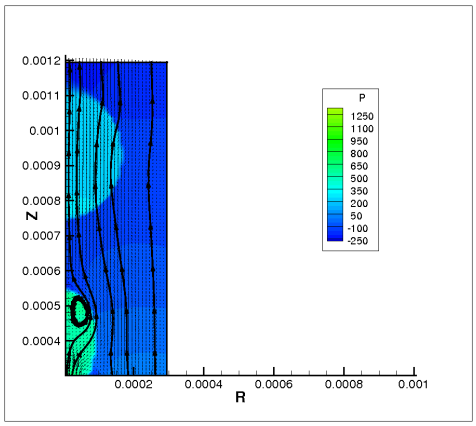


FIG. 9.29 – Champ de pression (en couleurs), champ de vitesse (flèches noires) et quelques lignes de courants (en trait noir épais), à l'instant "Temps de référence + 4.5 ms".

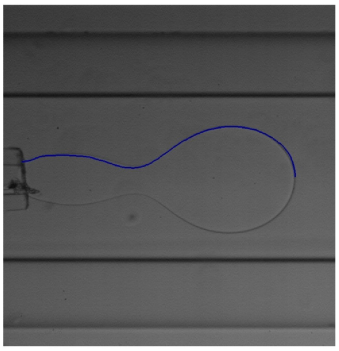


FIG. 9.30 – Comparaison entre simulation (Courbe bleu) et expérience, d'après une photo de P. Guillot. Voir texte pour les données physiques respectives.

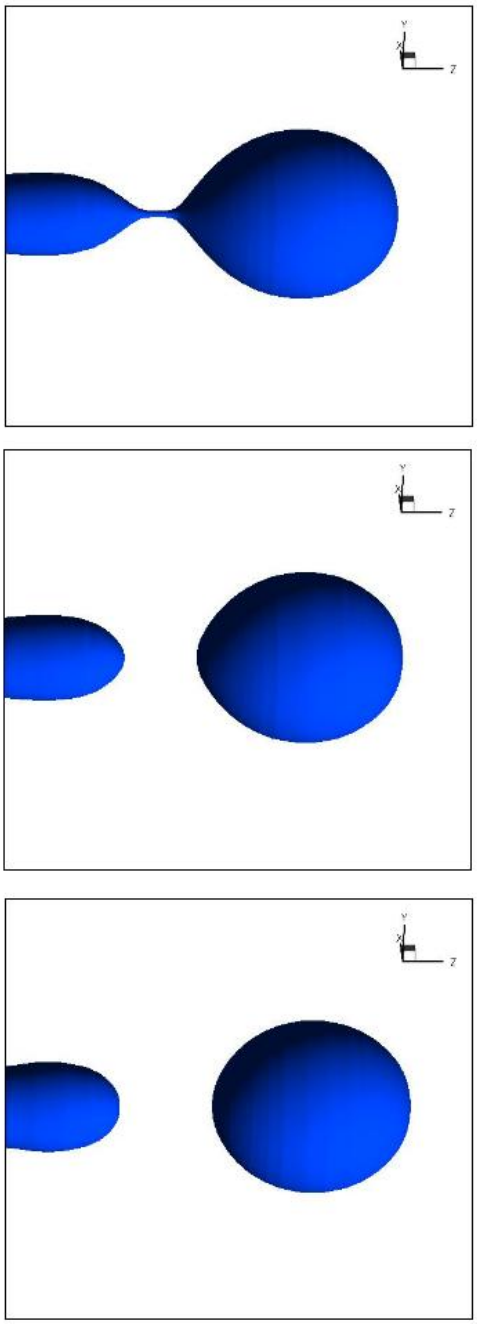


FIG. 9.31 – Création de la goutte autour de “Temps de référence + 1.3 ms”.

En conclusion des résultats de ce chapitre, nous avons observé que le code 3D axisymétrique développé permet de déterminer avec précision la dynamique de mélange au sein des microgouttes. Nous avons mis en évidence différents régimes et avons cerné l'influence des différents paramètres sur ces gouttes asymptotiques.

Par ailleurs, il a été montré que des simulations de qualité peuvent être réalisées pour appréhender la création de gouttes avec deux canaux cylindriques coaxiaux. Le travail effectué pour étendre le simulateur du 2D au 3D s'est donc révélé pleinement profitable et va permettre d'être plus en phase avec les expériences. Les résultats numériques captent bien la physique particulière induite par la prépondérance de la tension de surface. Cela est de bonne augure pour les campagnes parallèles que le LOF et l'IMB vont lancer pour comparer plus avant les résultats expérimentaux et numériques.

Une nouvelle fois, ces travaux permettent d'aider à la mise en place d'écoulements dont le contrôle permet d'aborder les applications pratiques.

Conclusion

Au cours de ces travaux, nous nous sommes attachés à développer des approches mathématiques spécifiques aux écoulements bifluides pilotés par la tension de surface. En particulier, nous les avons validées en étudiant la dynamique de gouttes dans des microcanaux.

La première partie de ce mémoire fut consacrée au suivi d'interface. Nous avons vu que ce concept apparaît fréquemment dans le monde qui nous entoure, qu'il soit concret ou abstrait. Cette omniprésence offre, tant au chercheur qu'à l'ingénieur, de nombreux problèmes ouverts et des applications aux enjeux sociétaux et scientifiques importants. Ensuite, il est apparu qu'à l'image de la variété de ses occurences, il existe une multitude de méthodes pour le suivi d'interface. Chaque méthode répond de manière inégale à l'ensemble des enjeux soulevés par la simulation d'interfaces mobiles, aussi le choix d'une approche dépend-il du champ d'application considéré. C'est en répondant à ces questions que nous avons choisi la méthode *Level Set* pour étudier la dynamique de fronts en microfluidique. Nous avons donc poursuivi par la description de cette méthode qui a fait école, en précisant les outils et les terminologies associées. Depuis son introduction, cette approche n'a cessé de s'améliorer et l'on peut désormais réaliser des simulations précises d'écoulements bifluides incompressibles. C'est ce que nous avons en effet constaté lors de la description des schémas (W)ENO. Il convenait logiquement de cheminer ensuite au travers des problèmes de redistanciation. Nous avons expliqué pourquoi la résolution des équations hyperboliques associées est relativement subtile, en reprenant le propos de Russo et Smereka dont la contribution sur les discrétisations "*truly upwind*" est décisive dans la mise au point de méthodes de réinitialisation qui ne perturbent pas les interfaces. Par ailleurs, nous avons présenté la méthode *Fast Marching* qui permet de réaliser des gains de temps substantiels.

Munis d'outils précis pour suivre des interfaces, nous avons abordé, dans la deuxième partie, certaines problématiques associées au champ de vitesse responsable du mouvement du front, ainsi qu'à la relation entre le transport et l'écoulement, lorsque ce dernier est piloté par la tension de surface. Tout d'abord, nous avons présenté les modèles utilisés pour simuler des écoulements de deux fluides immiscibles, en l'occurence, les équations de Navier-Stokes avec une contrainte d'incompressibilité et un terme de tension de surface dont la formulation utilise à profit les outils *Level Set*. Suivant les applications, on a aussi vu qu'un modèle de Stokes était suffisant pour capter la dynamique concernée. De plus, les conditions aux limites ont été détaillées, puisque le glissement à la paroi doit être pris en compte pour ces écoulements bifluides. Ensuite, nous avons proposé une approche pour discrétiser le modèle complet qui est caractérisé par *(i)* un découplage de la résolution de l'écoulement et du déplacement de l'interface ainsi que par *(ii)* une discrétisation explicite du terme de tension de surface. Une approche volumes-finis a été adoptée et le solveur est basé sur une méthode de Lagrangien Augmenté. Nous avons alors décrit la contribution principale de ces travaux en analyse nu-

mérique, c'est-à-dire, la dérivation d'une nouvelle condition de stabilité induite par le point *(ii)*. Cette condition constitue une alternative à celle de Brackbill, Kothe et Zemach [17] qui est aujourd'hui utilisée par la plupart des codes bifluides adoptant une approche découplée, évoquée en *(i)*. Le nouvel éclairage que nous apportons est basé sur l'étude des perturbations capillaires présentes sur des interfaces stabilisées, *i.e.* dans les situations où les effets d'inertie sont négligeables devant les effets visqueux. Il ressort de plus que les courants parasites près de l'interface, déja mentionnés dans la littérature, peuvent aussi s'interpréter comme étant le fruit de la transgression de cette condition de stabilité. Pour finir, nous avons introduit une méthode de décomposition de l'écoulement qui tire parti de la stationnarité des formes d'interface en microfluidique. Ce splitting conduit à une capture précise de la forme des gouttes et des vitesses associées. En outre, lorsque les vitesses sont faibles et que l'on souhaite étudier la translation d'un train de gouttes dans un canal droit (*e.g.* en relation avec l'analyse de réactions chimiques dans ces microréacteurs), cette méthode permet de diminuer les temps de calcul, d'autant plus fortement que les durées physiques à simuler sont longues.

Enfin, dans la troisième partie, nous avons appliqué l'ensemble des outils décrits précédemment à la simulation d'interfaces mobiles en microcanaux. La condition de stabilité et la méthode de splitting ont été validées numériquement grâce aux codes que nous avons entièrement développés. Nous présentons des simulations réalisées d'une part en géométrie bidimensionnelle et d'autre part en géométrie tridimensionnelle axisymétrique. En 2D, des tests classiques ont montré la capacité de nos modèles numériques à capter précisément les effets de la tension de surface et les changements topologiques. Ensuite, nous avons étudié plus en détails la dynamique de mélange au sein de microgouttes. Ceci constitue une autre contribution originale de ces travaux puisque que, grâce à des codes précis et rapides, nous avons mis à jour numériquement différents régimes de mélange relativement aux paramètres que sont le confinement, le volume des gouttes, la vitesse d'injection et les différences de viscosité entre les phases porteuse et dispersée. A notre connaissance, il s'agit des premiers résultats de ce type présentés dans la littérature. Ils sont en parfait accord qualitatif avec les expériences physiques réalisées au LOF. Par ailleurs, nous avons mené le même type d'analyses pour des gouttes 3D axisymétriques. Il ressort que les caractéristiques globales sont similaires, par rapport au cas bidimensionnel. Cependant, les réponses relatives à la variation des divers paramètres exhibent certaines différences. Des expériences vont être réalisées au LOF pour étudier la validité de ces différents régimes mis à jour par la simulation. Enfin, nous avons montré que le code 3D permet bien de simuler la création de microgouttes dans deux canaux cylindriques coaxiaux. La comparaison avec les films expérimentaux, de développement et rupture de jet, fait ressortir, une nouvelle fois, un bon accord qualitatif.

Avant d'aborder les perspectives de ces travaux nous souhaitons donner la parole, un instant, à George Whitesides qui nous confie sa vision du futur pour la microfluidique [187] :

> "C'est à la fois une science et une technologie. Elle dispose d'un potentiel important – qui pourrait même être révolutionnaire – à l'avenir. Elle en est encore à ses débuts et il reste beaucoup de travail à accomplir avant qu'elle puisse revendiquer un statut plus large que celui de champ académique actif. Nonobstant, les fondamentaux de cette discipline sont très solides : la plupart des technologies nécessitent la manipulation de fluides, et pouvoir réaliser ces opérations sur des volumes plus faibles, en contrôlant précisément et dynamiquement les concentrations ainsi qu'en découvrant et exploitant les nouveaux phénomènes qu'exhibent ces fluides à l'échelle micrométrique, doit être, en fin de compte, très important."

Perspectives

Plusieurs axes peuvent être approfondis à l'issue de ces travaux : d'une part, la poursuite des comparaisons entre les expériences et les simulations, d'autre part, le développement des outils numériques liés à la méthode *Level Set* et à la tension de surface ; ensuite, la modélisation numérique des conditions aux limites de sortie pour les gouttes ainsi que des phénomènes de mouillage, et par ailleurs, l'extension des applications du splitting. Nous allons préciser successivement ces points.

Comparaisons entre simulations et expériences

Il s'agit de perspectives à très court terme évoquées précédemment. Nous souhaitons réaliser une série d'échanges entre les travaux du LOF et de l'IMB pour mettre au point des configurations qui permettent de comparer aussi précisément que possible les deux approches. Des travaux doivent être menés pour s'affranchir, autant que possible, des incertitudes expérimentales et des indicateurs communs doivent être introduits pour réaliser les comparaisons. Par exemple, le volume des gouttes semble être l'une des quantités que les deux communautés peuvent capter avec précision. Une autre approche consiste à étudier le mélange dans les gouttes grâce à des traceurs passifs (encre, ...) ; du point de vue des simulations, il suffit d'utiliser les vitesses de l'écoulement dans un modèle de convection-diffusion (voire réaction) pour quantifier le mélange. De plus, dans le prolongement des simulations de création de gouttes, nous souhaitons simuler précisément les deux autres régimes que sont les jets et les "jettings" mentionnés dans [66]. Pour cela, il faudra notamment aborder les problèmes mentionnés dans le troisième axe de ces perspectives.

Outils numériques

Mentionnons tout d'abord quelques développements liés à la performance des outils *Level Set*. Une réalisation à très court terme consiste, comme nous l'avons mentionné au chapitre 1, à étudier les aspects bénéfiques de l'extension des vitesses et de son alliance avec l'équation de redistanciation. Ayant pour but de conserver une distance signée, on peut se demander s'il existe une combinaison optimale de ces deux outils.
Une autre approche qui mériterait d'être étudiée est la montée en ordre de précision pour les méthodes de type *Fast Marching* . Il existe en effet divers travaux qui ont déja abordé ce problème : Sethian propose une discrétisation à l'ordre deux dans [144]. Bien évidemment, le point clé réside dans l'initialisation de points de la Narrow Band, autour de l'interface, avec un ordre élevé. Pour cela Chopp propose une méthode itérative pour initialiser ces points adjacents à l'interface [28]. On doit pouvoir aussi monter en ordre en s'inspirant du travail de Russo et Smereka. Il serait intéressant de voir si une approche itérant la méthode *Fast Marching* permet de gagner en précision.
Un autre aspect, lié non pas aux outils *Level Set* mais à la discrétisation des équations de Navier-Stokes, concerne la construction de schémas volumes-finis conservant les flux au niveau de l'interface, sur un maillage MAC. Comme nous l'avions fait remarquer au chapitre 5, il s'agit, à notre connaissance, d'un problème ouvert. De récents progrès ont été réalisés en utilisant des maillages non structurés duaux. Ces analyses pourraient peut-être apporter plus d'informations quant à la possibilité de mettre au point des schémas conservatifs bifluides pour les maillages MAC.

Ensuite, les contraintes induites par la tension de surface suggèrent d'autres perspectives. D'une part, en relation directe avec la discussion sur la Proposition 6.2.1, il pourrait être

pertinent de développer un lisseur "sélectif" qui atténue les hautes fréquences de la courbure. La sélection en fréquence doit, bien sûr, s'opérer uniquement sur les artefacts numériques et non sur les composantes de la courbure qui traduisent la dynamique physique. Le but d'un tel lisseur consiste à relaxer le pas de temps capillaire induit par la condition de stabilité, de manière à ce qu'il ne soit pas contraint par des perturbations numériques artificielles. Dans le même esprit, pour des écoulements à vitesse très lente, il se peut que le pas de temps Δt_σ soit du même ordre que le pas de temps visqueux induit par une discrétisation complètement explicite des équations de Navier-Stokes. En conséquence, il serait judicieux de déterminer un critère pour savoir s'il faut impliciter ou expliciter les termes diffusifs, de manière à gagner du temps de calcul lorsque cela est possible (*i.e.* lorsque l'on peut se passer de la résolution d'un système linéaire).

Modélisation numérique

Par ailleurs, on peut aussi s'intéresser au traitement des conditions aux limites en sortie avec prise en compte de la tension de surface. L'une des réalisations directe, pour des canaux droits consiste à imposer une condition de Dirichlet que l'on déduit par translation de la solution à l'instant précédent (on peut d'ailleurs utiliser cette approche dans le cadre des conditions aux limites en traction [19, 20]). En revanche, il semble que la détermination d'une telle condition pour une sortie libre (on pense ici au cas d'une goutte confinée qui sort d'un canal et se retrouve soit à l'air libre, soit dans un canal beaucoup plus large, où, sous l'effet de la tension de surface, elle va converger vers une forme circulaire non confinée) soit un problème ardu. Sa résolution présente un intérêt certain pour la modélisation en microfluidique puisque la dynamique sévère des gouttes en sortie de canal induit, en amont, des effets importants qui modifient l'évolution des trains de gouttes dans le réseau.
De plus, les phénomènes de mouillage jouent un rôle prépondérant dans les microcanaux et il est probable que la mise en place de modèles pertinents demande un travail significatif.

Extension du splitting

En outre, il se dégage un troisième axe lié à l'extension des applications du splitting en microfluidique. Tout d'abord, l'une des perspectives directes liées au splitting est son couplage avec des équations de convection - réaction - diffusion, de manière à étudier des cinétiques chimiques réalisées dans les microgouttes. C'est une situation qui met pleinement à profit les gains de temps induits par cette décomposition. Ensuite, nous souhaitons étendre notre méthode de splitting aux cas où il y a plusieurs gouttes de vitesses différentes dans le domaine. La solution consiste à travailler en distinguant successivement chaque composante connexe. On peut alors obtenir un contrôle précis des vitesses et volumes des gouttes ainsi qu'une meilleure gestion des changements topologiques grâce à l'amélioration de la détection des informations à utiliser pour réaliser les calculs des normales et courbures. Ceci peut être prolongé en considérant le traitement de géométries présentant des jonctions de plusieurs canaux : le concept de vitesse de goutte s'étend en utilisant une fonction *Level Set* auxiliaire ψ associée à la forme des canaux (la direction du canal est alors orthogonale à $\nabla\psi$). En combinant ces approches multigouttes et multicanaux, on souhaite alors obtenir des simulations du comportement global de la propagation de trains de gouttes dans les réseaux microfluidiques. Pour cela, on utilise toujours une description basée sur la résolution d'écoulements de type Navier-Stokes mais, grâce au splitting, on détermine uniquement les vitesses de gouttes (on ne cherche pas à capter les asymptotiques en vitesse dans le référentiel de la goutte). Les temps de calculs sont alors sérieusement optimisés. On peut aussi comparer cette approche avec celle basée sur les

travaux d'Armand Ajdari [7]. Ces perspectives s'insèrent dans le projet ANR SCAN2.

Epilogue

Pour clore ce mémoire, nous mentionnerons un autre horizon qui se profile dans la continuité de ces travaux : l'extension des analyses menées sur les écoulements pilotés par la tension de surface dans le contexte de la modélisation et la simulation des mouvements de *cellules* à proximité de la paroi endothéliale. En effet, les échelles mises en jeu dans ces problèmes sont tout à fait comparables. On peut considérer qu'une cellule est constituée de trois éléments : le *noyau* (viscoélastique), entouré du *cytoplasme* (assimilable à un gel) qui est lui-même contenu dans une *membrane* (élastique). Il faut donc modifier les équations de Navier-Stokes pour prendre en compte les lois de comportement non-newtoniennes des différents milieux de la cellule et de son environnement. Bien sûr, ces aspects rhéologiques concernent la *dynamique passive*, il faut donc faire intervenir, en plus, des modèles *ad hoc* pour prendre en compte la *dynamique active* de la cellule. Les enjeux sont nombreux et constituent un domaine où la convergence d'expertises en biochimie, rhéologie et mathématiques laisse entrevoir des collaborations passionnantes.

Bibliographie

[1] R. Abgrall and S. Karni. Computations of compressible multifluids. *J. Comput. Phys.*, 169(2) :594–623, 2001.

[2] D. Adalsteinsson and J. A. Sethian. A fast level set method for propagating interfaces. *J. Comput. Phys.*, 118(2) :269–277, 1995.

[3] D. Adalsteinsson and J. A. Sethian. A level set approach to a unified model for etching, deposition, and lithography I : algorithms and two-dimensional simulations. *J. Comput. Phys.*, 120(1) :128–144, 1995.

[4] D. Adalsteinsson and J. A. Sethian. A level set approach to a unified model for etching, deposition, and lithography II : three-dimensional simulations. *J. Comput. Phys.*, 122(2) :348–366, 1995.

[5] D. Adalsteinsson and J. A. Sethian. A level set approach to a unified model for etching, deposition, and lithography III : redeposition, reemission, surface diffusion, and complex simulations. *J. Comput. Phys.*, 138(1) :193–223, 1997.

[6] D. Adalsteinsson and J. A. Sethian. The fast construction of extension velocities in level set methods. *J. Comput. Phys.*, 148 :2–22, 1999.

[7] A. Ajdari. Steady flows in networks of microfluidic channels : building on the analogy with electrical circuits. *Comptes Rendus Physique*, 5(5) :539–546, June 2004.

[8] N. Al-Rawahi and G. Tryggvason. Numerical simulation of dendritic solidification with convection : two-dimensional geometry. *J. Comput. Phys.*, 180(2) :471–496, 2002.

[9] P. Angot, C.-H. Bruneau, and P. Fabrie. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numerische Mathematik*, 81(4) :497–520, 1999.

[10] S. L. Anna, N. Bontoux, and H. A. Stone. Formation of dispersions using "flow focusing" in microchannels. *Applied Physics Letters*, 82(3) :364–366, 2003.

[11] U. M. Ascher, S. J. Ruuth, and R. J. Spiteri. Implicit-explicit runge-kutta methods for time-dependent partial differential equations. *Appl. Numer. Math.*, 25(2-3) :151–167, 1997.

[12] M. Bardi and S. Osher. The nonconvex multi-dimensional riemann problem for Hamilton-Jacobi equations. *SIAM J. Math. Anal.*, 22(2) :344–351, 1991.

[13] G. K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics.* Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, 1967.

[14] M. J. Berger and P. Colella. Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 82(1) :64–84, 1989.

[15] M. J. Berger and J. Oliger. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *J. Comput. Phys.*, 53(3) :484–512, 1984.

[16] F. Boyer. A theoretical and numerical model for the study of incompressible mixture flows. *Computers & Fluids*, 31(1) :41–68, January 2002.

[17] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2) :335–354, 1992.

[18] J. Breil. *Modélisation du remplissage en propergol de moteur à propulsion solide*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, Février 2001.

[19] C.-H. Bruneau and P. Fabrie. Effective downstream boundary conditions for incompressible Navier-Stokes equations. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 19(8) :693–705, 1994.

[20] C.-H. Bruneau and P. Fabrie. New efficient boundary conditions for incompressible Navier-Stokes equations : a well-posedness result. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.*, 30(7) :815–840, 1996.

[21] P. Burchard, L.-T. Cheng, B. Merriman, and S. Osher. Motion of curves in three spatial dimensions using a level set approach. *J. Comput. Phys.*, 170(2) :720–741, 2001.

[22] S. Chandrasekhar. *Hydrodynamic and hydromagnetic stability*. International Series of Monographs on Physics. Oxford : At the Clarendon Press. XIX, 652 p. , 1961.

[23] Y. C. Chang, T. Y. Hou, B. Merriman, and S. Osher. A level set formulation of eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 124(2) :449–464, March 1996.

[24] S. Chen and G. D. Doolen. Lattice boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1) :329–364, 1998.

[25] S. Chen, B. Merriman, S. Osher, and P. Smereka. A simple level set method for solving stefan problems. *J. Comput. Phys.*, 135(1) :8–29, 1997.

[26] L.-T. Cheng and Y.-H. Tsai. Redistancing by flow of time dependent eikonal equations. *J. Comput. Phys.*, 227(8) :64–84, 2008.

[27] D. L. Chopp. Computing minimal surfaces via level set curvature flow. *J. Comput. Phys*, 106 :77–91, 1993.

[28] D. L. Chopp. Some improvements of the fast marching method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23(1) :230–244, 2001.

[29] D. L. Chopp and J. A. Sethian. Flow under curvature : singularity formation, minimal surfaces, and geodesics. *Experiment. Math.*, 2(4) :235–255, 1993.

[30] A. J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *J. Comput. Phys.*, 2(1) :12–26, 1967.

[31] A. Colin and G. Cristobal. private communication, 2005.

[32] A. Colin, G. Cristobal, C. Galusinski, K. Khadra, and P. Vigneaux. Ecoulement de gouttes dans des microcanaux : simulations numériques et expériences. In *Proceedings du 18e Congrès Francais de Mécanique, 27 – 31 Août 2007, Grenoble, France*, 2007.

[33] A. Colin and P. Guillot. private communication, 2007.

[34] S. Colin. *Microfluidique*. Série Microsystèmes. Hermes Science Publications - Lavoisier, 2004.

[35] Collectif. *Lexis, Dictionnaire Larousse de la langue française*. Larousse/VUE, May 2002.

[36] G.-H. Cottet and E. Maitre. A level set method for fluid-structure interactions with immersed surfaces. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 16(3) :415–438, 2006.

[37] M. G. Crandall and P.-L. Lions. Viscosity solutions of Hamilton-Jacobi equations. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 277 :p. 1–42, 1983.

[38] M. G. Crandall and P.-L. Lions. Two approximations of solutions of Hamilton-Jacobi equations. *Mathematics of Computation*, 43 :p. 1–19, 1984.

[39] S. Davis. *Perspectives in Fluid Dynamics : A Collective Introduction to Current Research*, chapter 1. Cambridge University Press, 2000.

[40] R. DeBar. Fundamentals of the KRAKEN code. Tech. Rep. UCIR-760, Lawrence Livermore National Laboratory, 1974.

[41] A. Dervieux and F. Thomasset. A finite element method for the simulation of Rayleigh-Taylor instability. In *Lecture Notes in Mathematics*, volume 771, page 1979, 145–158.

[42] A. Dervieux and F. Thomasset. Multifluid incompressible flows by a finite element method. In *Lecture Notes in Physics*, volume 11, page 1981, 158–163.

[43] C. D. Eggleton and A. S. Popel. Large deformation of red blood cell ghosts in a simple shear flow. *Physics of Fluids*, 10(8) :1834–1845, 1998.

[44] C. Elmore and M. Heald. *Physics of Waves*. Mc-Graw-Hill, 1969.

[45] D. Enright, R. Fedkiw, J. Ferziger, and I. Mitchell. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *J. Comput. Phys.*, 183(1) :83–116, 2002.

[46] R. Fedkiw. Page personnelle : http ://graphics.stanford.edu/∼fedkiw/.

[47] R. P. Feynman. There's plenty of room at the bottom – an invitation to enter a new field of physics. *Annual meeting of the American Physical Society at the California Institute of Technology (Caltech)*, December 29th 1959.

[48] M. Fortin and R. Glowinsky. *Méthodes de Lagrangien Augmenté - Applications à la résolution numérique de problèmes aux limites*. Méthodes Mathématiques de l'Informatique. Dunod, 1982.

[49] M. Fortin and R. Glowinsky. *Augmented Lagrangian methods : applications to the numerical solution of boundary-value problems*, volume 15 of *Series in Mathematics and its applications*. North-Holland, 1983.

[50] M. M. Francois, S. J. Cummins, E. D. Dendy, D. B. Kothe, J. M. Sicilian, and M. W. Williams. A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. *J. Comput. Phys.*, 213(1) :141–173, 2006.

[51] C. Froidevaux, M.-C. Gaudel, and M. Soria. *Types de données et algorithmes,*. McGraw-Hill, 1992.

[52] J.-F. Gerbeau, C. Le Bris, and T. Lelièvre. *Mathematical methods for the magnetohydrodynamics of liquid metals*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford University Press, Oxford, 2006.

[53] J.-F. Gerbeau and T. Lelièvre. Variational formulation of the Generalized Navier Boundary Condition. *INRIA Research Report*, 2006.

[54] J.-F. Gerbeau, T. Lelièvre, and C. L. Bris. Simulations of MHD flows with moving interfaces. *J. Comput. Phys.*, 184(1) :163–191, 2003.

[55] J.-F. Gerbeau, T. Lelièvre, and C. L. Bris. Modeling and simulation of the industrial production of aluminium : the nonlinear approach. *Computers & Fluids*, 33(5-6) :801–814, 2004.

[56] F. Gibou. Page personnelle : http ://www1.engr.ucsb.edu/∼fgibou/.

[57] F. Gibou, R. Fedkiw, R. Caflisch, and S. Osher. A level set approach for the numerical simulation of dendritic growth. *J. Sci. Comput.*, 19(1-3) :183–199, 2003.

[58] I. Ginzburg and K. Steiner. Lattice boltzmann model for free-surface flow and its application to filling process in casting. *J. Comput. Phys.*, 185(1) :61–99, 2003.

[59] J. Glimm, J. W. Grove, X. L. Li, K. ming Shyue, Y. Zeng, and Q. Zhang. Three-dimensional front tracking. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 19(3) :703–727, 1998.

[60] J. Glimm, J. W. Grove, X. L. Li, and D. C. Tan. Robust computational algorithms for dynamic interface tracking in three dimensions. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 21(6) :2240–2256, 2000.

[61] S. Godunov. A finite difference method for the computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. *Mat. Sb.*, 47 :p. 357–393, 1959.

[62] M. A. Grayson. The heat equation shrinks embedded plane curves to round points. *J. Differential Geom.*, 26(2) :285–314, 1987.

[63] M. A. Grayson. A short note on the evolution of a surface by its mean curvature. *Duke Math. J.*, 58(3) :555–558, 1989.

[64] D. Gueyffier, J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *J. Comput. Phys.*, 152(2) :423–456, 1999.

[65] H. Guillard and R. Abgrall. *Modélisation numérique des fluides compressibles.* Series in Applied Mathematics. Elsevier/Gauthier-Villars, 2001.

[66] P. Guillot. *Ecoulement defluides immiscibles dans un canal submillimétrique : stabilité et application à la rhéologie.* PhD thesis, Université Bordeaux 1, 2006.

[67] P. Guillot, P. Panizza, J.-B. Salmon, M. Joanicot, A. Colin, C.-H. Bruneau, and T. Colin. Viscosimeter on a microfluidic chip. *Langmuir*, 22(14) :6438–6445, 2006.

[68] É. Guyon, J.-P. Hulin, and L. Petit. *Hydrodynamique physique.* Savoirs Actuels - Physique. EDP Sciences - CNRS Éditions, 2001.

[69] F. H. Harlow and J. P. Shannon. The splash of a liquid drop. *Journal of Applied Physics*, 38(10) :3855–3866, 1967.

[70] F. H. Harlow and J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of Fluids*, 8(12) :2182–2189, 1965.

[71] A. Harten, B. Engquist, S. Osher, and S. R. Chakravarthy. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III. *J. Comput. Phys.*, 71(2) :231–303, 1987.

[72] A. Harten and S. Osher. Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 24(2) :279–309, 1987.

[73] C. Hirt, J. L. Cook, and T. D. Butler. A lagrangian method for calculating the dynamics of an incompressible fluid with free surface. *J. Comput. Phys.*, 5(1) :103–124, 1970.

[74] C. W. Hirt, A. A. Amsden, and J. L. Cook. An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds. *J. Comput. Phys.*, 14(3) :227–253, 1974.

[75] T. Y. Hou, J. S. Lowengrub, and M. J. Shelley. Boundary integral methods for multicomponent fluids and multiphase materials. *J. Comput. Phys.*, 169(2) :302–362, 2001.

[76] H. H. Hu, N. A. Patankar, and M. Y. Zhu. Direct numerical simulations of fluid-solid systems using the arbitrary Langrangian-Eulerian technique. *J. Comput. Phys.*, 169(2) :427–462, 2001.

[77] W. Hundsdorfer, S. Ruuth, and R. Spiteri. Monotonicity-preserving linear multistep methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 41(2) :605–623, 2003.

[78] S. Hysing. A new implicit surface tension implementation for interfacial flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 51(6) :659–672, 2006.

[79] T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima, and N. Konishi. A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences. *J. Comput. Phys.*, 198(2) :628–644, 2004.

[80] D. Jacqmin. Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling. *J. Comput. Phys.*, 155(1) :96–127, 1999.

[81] D. Jamet, O. Lebaigue, N. Coutris, and J. M. Delhaye. The Second Gradient Method for the direct numerical simulation of liquid-vapor flows with phase change. *J. Comput. Phys.*, 169(1) :624–651, 2001.

[82] D. Jamet, D. Torres, and J. U. Brackbill. On the theory and computation of surface tension : the elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method. *J. Comput. Phys.*, 182(1) :262–276, 2002.

[83] G.-S. Jiang and D. Peng. Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 21(No. 6) :p. 2126–2143, 2000.

[84] G.-S. Jiang and C.-W. Shu. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *J. Comput. Phys*, 126 :p. 202–228, 1996.

[85] M. Joanicot and A. Ajdari. APPLIED PHYSICS : Droplet Control for Microfluidics. *Science*, 309(5736) :887–888, 2005.

[86] D. Juric and G. Tryggvason. Computations of boiling flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 24(3) :387–410, April 1998.

[87] M. Kang, R. P. Fedkiw, and X.-D. Liu. A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow. *J. Sci. Comput.*, 15(No. 3) :p. 323–360, 2000.

[88] S. Karni. Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm. *J. Comput. Phys.*, 112(1) :31–43, 1994.

[89] G. Karniadakis, A. Beskok, and N. Aluru. *Microflows and nanoflows*, volume 29 of *Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer, New York, 2005. Fundamentals and simulation, With a foreword by Chih-Ming Ho.

[90] G. E. Karniadakis and A. Beskok. *Micro flows*. Springer-Verlag, New York, 2002. Fundamentals and simulation.

[91] J. Kim, K. Kang, and J. Lowengrub. Conservative multigrid methods for Cahn-Hilliard fluids. *J. Comput. Phys.*, 193(2) :511–543, 2004.

[92] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *J. Comput. Phys.*, 113(1) :134–147, 1994.

[93] M.-C. Lai and C. S. Peskin. An immersed boundary method with formal second-order accuracy and reduced numerical viscosity. *J. Comput. Phys.*, 160(2) :705–719, 2000.

[94] L. Lee and R. J. LeVeque. An immersed interface method for incompressible Navier–Stokes equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25(3) :832–856, 2003.

[95] R. J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. Lectures in Mathematics ETH Zürich. Birkhäuser Verlag, Basel, second edition, 1992.

[96] H. Liu, S. Krishnan, S. Marella, and H. S. Udaykumar. Sharp interface cartesian grid method ii : a technique for simulating droplet interactions with surfaces of arbitrary shape. *J. Comput. Phys.*, 210(1) :32–54, 2005.

[97] X.-D. Liu, S. Osher, and T. Chan. Weighted Essentially Non-Oscillatory schemes. *J. Comput. Phys*, 126 :p. 200–212, 1994.

[98] F. Losasso, F. Gibou, and R. Fedkiw. Simulating water and smoke with an octree data structure. In *SIGGRAPH '04 : ACM SIGGRAPH 2004 Papers*, pages 457–462, New York, NY, USA, 2004. ACM Press.

[99] A. Malidi, S. Dufour, and D. N'dri. A study of time integration schemes for the numerical modelling of free surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 48(10) :1123–1147, 2005.

[100] R. Malladi, J. Sethian, and B. Vemuri. Evolutionary fronts for topology-independant shape modeling and recovery. In *Proceedings of Third European Conference on Computer Vision, Stockholm, Sweden, Lecture Notes in Computer Science, 800*, pages 3–13, 1994.

[101] E. Marchandise, P. Geuzaine, N. Chevaugeon, and J.-F. Remacle. A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for the computation of bubble dynamics. *J. Comput. Phys.*, 225(1) :949–974, 2007.

[102] E. Marchandise and J.-F. Remacle. A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for solving two phase incompressible flows. *J. Comput. Phys.*, 219(2) :780–800, 2006.

[103] G. Markstein. *Nonsteady Flame Propagation*. Pergamon Press, Oxford, 1964.

[104] B. Maury. Direct simulations of 2d fluid-particle flows in biperiodic domains. *J. Comput. Phys.*, 156(2) :325–351, 1999.

[105] J. C. Maxwell. *Philos. Trans. R. Soc. London*, 170 :213, 1879.

[106] E. McKean, editor. *The New Oxford American Dictionary*. Oxford University Press, second edition, May 2005.

[107] M. D. Menech. Modeling of droplet breakup in a microfluidic t-shaped junction with a phase-field model. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 73(3) :031505, 2006.

[108] J. J. Monaghan. Simulating free surface flows with sph. *J. Comput. Phys.*, 110(2) :399–406, 1994.

[109] J. P. Morris. Simulating surface tension with smoothed particle hydrodynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 33(3) :333–353, 2000.

[110] W. Mulder, S. Osher, and J. Sethian. Computing interface motion in compressible gas dynamics. *J. Comput. Phys*, 100 :p. 209–228, 1992.

[111] T. Nakayama and M. Mori. An eulerian finite element method for time-dependent free surface problems in hydrodynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 22(3) :175–194, 1996.

[112] W. F. Noh and P. Woodward. SLIC /simple line interface calculation/. In A. I. van de Vooren and P. J. Zandbergen, editors, *Some Methods of Resolution of Free Surface Problems*, volume 59 of *Lecture Notes in Physics, Berlin Springer Verlag*, pages 330–340, 1976.

[113] T. Okamoto and M. Kawahara. Two-dimensional sloshing analysis by Lagrangian finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 11(5) :453–477, 1990.

[114] E. Olsson and G. Kreiss. A conservative level set method for two phase flow. *J. Comput. Phys.*, 210(1) :225–246, 2005.

[115] S. Osher and R. Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*, volume 153 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer, 2003.

[116] S. Osher and J. Sethian. Fronts propagating with curvature dependant speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J. Comput. Phys*, 79 :p. 12–49, 1988.

[117] S. Osher and C.-W. Shu. High-order Essentially Non-Oscillatory schemes for Hamilton-Jacobi equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28(No. 4) :p. 907–922, 1991.

[118] D. Peng, B. Merriman, S. Osher, H. Zhao, and M. Kang. A PDE-based fast local level set method. *J. Comput. Phys.*, 155(2) :410–438, 1999.

[119] C. S. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *J. Comput. Phys.*, 25 :220–252, 1977.

[120] C. S. Peskin and B. F. Printz. Improved volume conservation in the computation of flows with immersed elastic boundaries. *J. Comput. Phys.*, 105(1) :33–46, 1993.

[121] J.-M. Poiseuil. Recherches expérimentales sur le mouvement des liquides dans les tubes de très petits diamètres. *Comptes Rendus Hebdomadaires de l'Académie des Sciences*, 11 :961–967 & 1041–1048, 1840.

[122] S. Popinet and S. Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30(6) :775–793, 1999.

[123] C. Pozrikidis. Interfacial dynamics for Stokes flow. *J. Comput. Phys.*, 169(2) :250–301, 2001.

[124] T. Qian, X.-P. Wang, and P. Sheng. Molecular scale contact line hydrodynamics of immiscible flows. *Phys. Rev. E*, 68(1) :016306, Jul 2003.

[125] B. Ramaswamy and M. Kawahara. Arbitrary Lagrangian-Eulerian finite element method for unsteady, convective, incompressible viscous free surface fluid flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 7(10) :953–984, 1987.

[126] B. Ramaswamy and M. Kawahara. Lagrangian finite element analysis applied to viscous free surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 7(9) :953–984, 1987.

[127] L. Rayleigh. On the capillary phenomena of jets. *Proceedings of the Royal Society of London*, 29 :71–97, 1879.

[128] Y. Renardy. The effects of confinement and inertia on the production of droplets. *Rheologica Acta*, 46(4) :521–529, March 2007.

[129] Y. Renardy and M. Renardy. PROST : a parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. *J. Comput. Phys.*, 183(2) :400–421, 2002.

[130] W. J. Rider and D. B. Kothe. Reconstructing volume tracking. *J. Comput. Phys.*, 141(2) :112–152, 1998.

[131] A. Rogerson and E. Meiburg. A numerical study of the convergence properties of ENO schemes. *J. Sci. Comput.*, 5(No. 2) :p. 151–167, 1990.

[132] E. Rouy and A. Tourin. A viscosity solutions approach to shape-from-shading. *SIAM J. Numer. Anal.*, 29(3) :867–884, 1992.

[133] M. Rudman. A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 28(2) :357–378, 1998.

[134] G. Russo and P. Smereka. A remark on computing distance functions. *J. Comput. Phys.*, 163(1) :51–67, 2000.

[135] S. J. Ruuth and W. Hundsdorfer. High-order linear multistep methods with general monotonicity and boundedness properties. *J. Comput. Phys.*, 209(1) :226–248, 2005.

[136] J.-B. Salmon, A. Ajdari, P. Tabeling, L. Servant, D. Talaga, and M. Joanicot. In situ Raman imaging of interdiffusion in a microchannel. *Applied Physics Letters*, 86(9) :094106, 2005.

[137] F. Sarrazin, K. Loubière, L. Prat, C. Gourdon, T. Bonometti, and J. Magnaudet. Experimental and numerical study of droplets hydrodynamics in microchannels. *AIChE Journal*, 52(12) :4061–4070, 2006.

[138] R. Saurel and R. Abgrall. A multiphase Godunov method for compressbile multifluid and multiphase flows. *J. Comput. Phys.*, 150(2) :425–467, 1999.

[139] R. Scardovelli and S. Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, (31) :567–603, 1999.

[140] R. Scardovelli and S. Zaleski. Interface reconstruction with least-square fit and split eulerian-lagrangian advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 41(3) :251–274, 2003.

[141] A. Schmidt. Computation of three dimensional dendrites with finite elements. *J. Comput. Phys.*, 125(2) :293–312, 1996.

[142] R. Sedgewick. *Algorithms*. Addison Wesley, second edition, 1988.

[143] J. A. Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. *Proc. Nat. Acad. Sci - Applied Mathematics*, 93(4) :1591–1595, February 1996.

[144] J. A. Sethian. Fast marching methods. *SIAM Review*, 41(2) :199–235, 1999.

[145] J. A. Sethian. *Level Set Methods and Fast Marching Methods - Evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision and materials science*, volume 3 of *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics*. Cambridge University Press, second edition, 1999.

[146] J. A. Sethian and J. Strain. Crystal growth and dendritic solidification. *J. Comput. Phys.*, 98(2) :231–253, 1992.

[147] S. Shin, S. I. Abdel-Khalik, V. Daru, and D. Juric. Accurate representation of surface tension using the level contour reconstruction method. *J. Comput. Phys.*, 203(2) :493–516, 2005.

[148] 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(2) :427–470, 2002.

[149] E. Shirani, N. Ashgriz, and J. Mostaghimi. Interface pressure calculation based on conservation of momentum for front capturing methods. *J. Comput. Phys.*, 203(1) :154–175, 2005.

[150] C.-W. Shu. Numerical experiments on the accuracy of ENO and modified ENO schemes. *J. Sci. Comput.*, 5(No. 2) :p. 127–149, 1990.

[151] C.-W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of Essentially Non-oscillatory shock-capturing schemes I. *J. Comput. Phys*, 77 :p. 439–471, 1988.

[152] C.-W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of Essentially Non-oscillatory shock-capturing schemes II. *J. Comput. Phys*, 83 :p. 32–78, 1989.

[153] K.-M. Shyue. An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems. *J. Comput. Phys.*, 142(1) :208–242, 1998.

[154] P. Smereka. Spiral crystal growth. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 138(3-4) :282–301, 15 April 2000.

[155] A. Smolianski. Finite-element/level-set/operator-splitting (FELSOS) approach for computing two-fluid unsteady flows with free moving interfaces. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 48(3) :231–269, 2005.

[156] H. Song and R. Ismagilov. Millisecond kinetics on a microfluidic chip using nanoliters of reagents. *Journal of the American Chemical Society*, 125(47) :14613–14619, 2003.

[157] P. D. Spelt. A level-set approach for simulations of flows with multiple moving contact lines with hysteresis. *J. Comput. Phys*, 207 :p. 389–404, 2005.

[158] R. J. Spiteri and S. J. Ruuth. A new class of optimal high-order strong-stability-preserving time discretization methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 40(2) :469–491, 2002.

[159] H. Stone, A. Stroock, and A. Ajdari. Engineering flows in small devices : Microfluidics toward a lab-on-a-chip. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 36 :381–411, 2004.

[160] J. Strain. A boundary integral approach to unstable solidification. *J. Comput. Phys.*, 85 :342–389, 1989.

[161] J. Strain. Fast tree-based redistancing for level set computations. *J. Comput. Phys.*, 152(2) :664–686, 1999.

[162] J. Strain. Semi-lagrangian methods for level set equations. *J. Comput. Phys.*, 151(2) :498–533, 1999.

[163] J. Strain. Tree methods for moving interfaces. *J. Comput. Phys.*, 151(2) :616–648, 1999.

[164] 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(1) :110–136, 2003.

[165] M. Sussman, A. S. Almgren, J. B. Bell, P. Colella, L. H. Howell, and M. L. Welcome. An adaptive level set approach for incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 148(1) :81–124, 1999.

[166] M. Sussman and E. Fatemi. An efficient, interface-preserving level set redistancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(No. 4) :p. 1165–1191, 1999.

[167] M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, and S. Osher. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids*, 27 :p. 663–680, 1998.

[168] M. Sussman and E. G. Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 162(2) :301–337, 2000.

[169] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys*, 114 :p. 146–159, 1994.

[170] P. Tabeling. *Introduction à la microfluidique*. Collection Échelles. Belin, 2003.

[171] R. Temam. Sur l'approximation des solutions des équations de Navier-Stokes. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. A*, 262 :219–221, 1966.

[172] E. Thompson. Use of pseudo-concentrations to follow creeping viscous flows during transient analysis. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 6(10) :749–761, 1986.

[173] M. Tomé, A. Filho, J. Cuminato, N. Mangiavacchi, and S. Mckee. GENSMAC3D : a numerical method for solving unsteady three-dimensional free surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 37(7) :747–796, 2001.

[174] M. F. Tomé, J. L. Doricio, A. Castelo, J. A. Cuminato, and S. McKee. Solving viscoelastic free surface flows of a second-order fluid using a marker-and-cell approach. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 53(4) :599–627, 2007.

[175] A. Y. Tong and Z. Wang. A numerical method for capillarity-dominant free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 221(2) :506–523, February 2007.

[176] E. F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics – A practical introduction*. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 1999.

[177] D. J. Torres and J. U. Brackbill. The point-set method : front-tracking without connectivity. *J. Comput. Phys.*, 165(2) :620–644, 2000.

[178] M. B. Townsend, E. D. Dawson, M. Mehlmann, J. A. Smagala, D. M. Dankbar, C. L. Moore, C. B. Smith, N. J. Cox, R. D. Kuchta, and K. L. Rowlen. Experimental Evaluation of the FluChip Diagnostic Microarray for Influenza Virus Surveillance. *J. Clin. Microbiol.*, 44(8) :2863–2871, 2006.

[179] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.-J. Jan. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *J. Comput. Phys.*, 169(2) :708–759, 2001.

[180] J. N. Tsitsiklis. Efficient algorithms for globally optimal trajectories. *IEEE Trans. Automat. Control*, 40(9) :1528–1538, 1995.

[181] H. S. Udaykumar, H.-C. Kan, W. Shyy, and R. Tran-Son-Tay. Multiphase dynamics in arbitrary geometries on fixed Cartesian grids. *J. Comput. Phys.*, 137(2) :366–405, 1997.

[182] C. University. http ://www.news.cornell.edu/releases/july97/guitar.ltb.html – science news – july 22, 1997.

[183] S. O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *J. Comput. Phys.*, 100(1) :25–37, 1992.

[184] S. P. van der Pijl, A. Segal, C. P. Vuik, and P. Wesseling. A mass-conserving level-set method for modelling of multi-phase flows. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, Vol. 47 :p. 339–361, 2005.

[185] H. A. van der Vorst. Bi-CGSTAB : A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13(2) :631–644, 1992.

[186] A. Veldman, J. Gerrits, R. Luppes, J. Helder, and J. Vreeburg. The numerical simulation of liquid sloshing on board spacecraft. *J. Comput. Phys.*, In Press, Corrected Proof, Available online 10 January 2007.

[187] G. M. Whitesides. The origins and the future of microfluidics. *Nature*, 442 :368–373, 27 July 2006.

[188] T. Yabe, F. Xiao, and T. Utsumi. The constrained interpolation profile method for multiphase analysis. *J. Comput. Phys.*, 169(2) :556–593, 2001.

[189] J.-D. Yu, S. Sakai, and J. Sethian. A coupled level set projection method applied to ink jet simulation. *Interfaces and Free Boundaries*, 5(4) :459–482, 2003.

[190] J.-D. Yu, S. Sakai, and J. Sethian. A coupled quadrilateral grid level set projection method applied to ink jet simulation. *Journal of Computational Physics*, 206(1) :227–251, June 2005.

[191] J.-D. Yu, S. Sakai, and J. Sethian. Two-phase viscoelastic jetting. *Journal of Computational Physics*, 220(2) :568–585, January 2007.

[192] S. T. Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *J. Comput. Phys*, 31 :p. 335–362, 1979.

[193] H.-K. Zhao, T. Chan, B. Merriman, and S. Osher. A variational level set approach to multiphase motion. *J. Comput. Phys.*, 127(1) :179–195, 1996.

[194] H.-K. Zhao, B. Merriman, S. Osher, and L. Wang. Capturing the behavior of bubbles and drops using the variational level set approach. *J. Comput. Phys.*, 143(2) :495–518, 1998.

[195] H.-K. Zhao, S. Osher, and R. Fedkiw. Fast surface reconstruction using the level set method. *1st IEEE Workshop on Variational and Level Set Methods, 8th International Conference on Computer Vision (ICCV), Vancouver, Canada*, pages 194–202, 2001.

Table des figures

1 Création de gouttes dans un microcanal et étude de la réaction d'un colorant – Image de Galder Cristobal (LOF). 2

1.1 Déferlement plongeant d'une vague : une interface entre l'eau et l'air 8
1.2 Interface eau/air à géométrie complexe et avec des changements topologiques . 8
1.3 Simulations de deux coulées successives de propergol dans un booster d'Ariane V [18]. Lors de ce remplissage, qui se fait en une dizaine d'injections à intervalles séparés, le propergol est à l'état liquide mais commence à se solidifier par un processus de réticulation. Il faut prendre garde, lors de ce processus, que des défauts comme des bulles d'air, ne restent pas piégés dans le propergol, une fois qu'il s'est solidifié. En effet, la vitesse de combustion, au décollage de la fusée, en serait altérée. 9
1.4 Le suivi d'interface peut servir à décrire des processus de déposition sur une surface solide initiale (a) qui va croître et atteindre la configuration (b) 10
1.5 Simulation en croisance dendritique extraite de [57] : un pentagone (au centre) voit des dendrites se développer préférentiellement suivant les axes diagonaux . 10
1.6 Une interface (en gris foncé) évoluant pour détecter un réseau artériel en imagerie médicale [100] 11
1.7 Suivi d'interface et reconstruction à partir d'un ensemble de points provenant d'une IRM [195] 11
1.8 Illustration du théorème Grayson où une courbe du plan commence à se contracter vers un point, extrait de [145] 12
1.9 Illustration du contre-exemple de Grayson où une surface, dans un espace tridimensionnel, se scinde en plusieurs surfaces distinctes, extrait de [29] 12
1.10 Zoom à l'échelle moléculaire sur la zone entre deux milieux. Une interface est-elle diffuse ou ponctuelle ? 13
1.11 Du continu au discret : approche intuitive de la représentation d'une interface . 14
1.12 Déplacement d'une interface par l'intermédiaire des points de sa caractérisation discrète : la courbe noire en trait continu évolue vers la courbe noire en pointillés grâce à l'interpolation de la nouvelle position des marqueurs (disques noirs) qui se sont déplacés sous l'action des vitesses représentées par les flèches 14
1.13 L'éclaboussure provoquée par l'impact d'une goutte sur une surface libre, simulée par Harlow et Shannon dans un article de 1967 [69] utilisant la méthode MAC 16
1.14 Méthode VOF sur un maillage cartésien : représentation discrète d'une interface à l'aide de la fraction volumique f, relativement au fluide A. 18
1.15 Différentes reconstructions géométriques de l'interface, à partir de la fraction volumique (a) : méthode SLIC originelle (b), méthode PLIC (c) 18

1.16 Examen formel de la gestion des changements topologiques avec une méthode lagrangienne. Deux interfaces vont fusionner (a). Après le transport lagrangien des particules (b), certaines (zone en pointillés) se retrouvent à l'intérieur de la nouvelle interface obtenue et une opération "chirurgicale" est nécessaire pour les supprimer. Une fois la procédure effectuée (c), il ne reste que des marqueurs *sur* l'interface. 21

2.1 Une interface Γ dans $\mathbb{R}^2$ 24
2.2 Une fonction Level Set ϕ définissant implicitement une interface Γ circulaire . . 24
2.3 Evolution d'une interface par la méthode Level Set 25
2.4 Changement topologique et méthode Level Set 26
2.5 Représentation discrète du Dirac, à l'aide d'une version lissée, δ_ε qui tend vers δ quand ε tend vers 0. 29
2.6 Simulation Level Set avec des octrees (extraites de [56] et détaillées dans [98]) : à gauche, formation d'un couronne de lait aprés l'impact d'une sphère ; à droite, une ellipse propulsée juste sous la surface libre. Grâce à cette approche de raffinement du maillage, il est possible de bien capter le développement des films minces, avec des temps de calcul raisonnables. 32

3.1 Maillage 1D : l'inconnue ϕ et la vitesse u sont données aux points i, séparés de la distance Δx du pas de discrétisation en espace. 36
3.2 Maillage 2D : l'inconnue ϕ et la vitesse $\mathbf{v} = (u; v)$ sont données aux points $(i; j)$. On note Δx le pas de discrétisation en espace dans la direction i et Δy celui dans la direction j ; ces pas sont considérés constants sur tout le maillage. . . . 38
3.3 Disque de Zalesak (trait noir épais) et donnée initiale (isos colorées) 49
3.4 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 25 ; ENO1 51
3.5 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 50 ; ENO1 51
3.6 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 100 ; ENO1 52
3.7 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 200 ; ENO1 52
3.8 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 400 ; ENO1 53
3.9 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 800 ; ENO1 53
3.10 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 25 ; ENO2 55
3.11 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 50 ; ENO2 55
3.12 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 100 ; ENO2 56
3.13 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 200 ; ENO2 56
3.14 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 400 ; ENO2 57
3.15 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 800 ; ENO2 57
3.16 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 25 ; ENO3 59
3.17 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 50 ; ENO3 59
3.18 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 100 ; ENO3 60
3.19 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 200 ; ENO3 60
3.20 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 400 ; ENO3 61
3.21 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 800 ; ENO3 61
3.22 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 25 ; WENO5 63
3.23 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 50 ; WENO5 63
3.24 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 100 ; WENO5 64
3.25 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 200 ; WENO5 64
3.26 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 400 ; WENO5 65
3.27 ϕ_{exact} (trait noir) et $\phi_{calculé}$ (trait bleu) pour N = 800 ; WENO5 65
3.28 ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 200, ENO1 . . . 68

3.29 ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 800, ENO1 . . . 68
3.30 ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 200, ENO2 . . . 69
3.31 ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 800, ENO2 . . . 69
3.32 ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 200, ENO3 . . . 70
3.33 ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 800, ENO3 . . . 70
3.34 ϕ_{exact} (trait noir) et $|\phi_{exact} - \phi_{calculé}|$ (isos colorées) pour N = 200, WENO5 . . 71

4.1 Propagation de l'information lors de la redistanciation (flèches en tirets) et normales aux lignes de niveau de ϕ (flèches en gras) . . . 75
4.2 Construction d'un schéma upwind . . . 76
4.3 Schéma 2D non upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires) . . . 78
4.4 Schéma 2D non upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), ENO2 . . . 78
4.5 Schéma 2D non upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), WENO5 . . . 79
4.6 Schéma 2D non upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), WENO5 zoom, sgn lissé . . . 79
4.7 Schéma 2D non upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), WENO5 zoom, sgn exact . . . 80
4.8 Schéma 2D upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires) . . . 81
4.9 Schéma 2D upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), zoom pour comparer avec la Figure 4.6 . . . 81
4.10 Schéma 2D upwind pour la redistanciation : donnée initiale (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), zoom accentué pour discerner les itérés . . . 82
4.11 Schéma 2D upwind pour la redistanciation : donnée initiale elliptique (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires) . . . 83
4.12 Lignes de niveau (de -1 à 1 par pas de 0.2) de la donnée initiale elliptique perturbée (maillage 16x16) . . . 84
4.13 Schéma 2D upwind pour la redistanciation : donnée initiale elliptique perturbée (iso bleu) et itérations 160 à 800 (isos noires), zoom . . . 84
4.14 Lignes de niveau (de -1 à 1 par pas de 0.2) du 800^e itéré pour la donnée initiale elliptique perturbée . . . 85
4.15 Lignes de niveau (de -2 à 2 par pas de 0.2) pour N_t = 0, 50, 150, 250 avec la donnée initiale elliptique perturbée (dont l'iso-0 est affichée en noir sur les 4 graphes) ; $\Delta x = 10/200$ et $\Delta t = \Delta x/4$ . . . 86
4.16 Erreur L^1 au cours du temps, pour différents maillages et méthodes . . . 87
4.17 Partitionnement du domaine de calcul pour la méthode *Fast Marching*. Les flèches bleues (en trait épais) indiquent le sens de propagation de la Narrow Band. . . . 90
4.18 Configuration des points du maillage pour le calcul de ϕ au point U . . . 91
4.19 Représentation arborescente d'un tas . . . 94
4.20 Représentation séquentielle d'un tas . . . 94
4.21 Remontée d'une cellule . . . 95

5.1 Le domaine $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ où évoluent les deux fluides, séparés par l'interface Γ. 100
5.2 Partitionnement du bord de Ω pour affecter différentes conditions aux limites. . 103
5.3 Ecoulement de Poiseuille . . . 104
5.4 géométrie et conditions aux limites pour une croix . . . 105

5.5 Effet de la compatibilité des vitesses d'injection, dans la configuration présentée Figure 5.4. . . . 105
5.6 Méthode de translation pour corriger la variation de masse, selon [155]. Les isovaleurs en gras sont : à gauche, l'ancienne interface et à droite, la nouvelle interface dont l'aire associée vérifie la conservation de la masse. . . . 107
5.7 Maillage MAC (ou grille décalée) (a) et localisation des indices i, j (b) mentionnée dans le texte . . . 109
5.8 Volume de contrôle de $\mathrm{u}_{i,j}$. Les traits en pointillés représentent le maillage physique. . . . 111
5.9 Maille en u tangente à une paroi horizontale . . . 114
5.10 Maille en v tangente au bord d'injection . . . 115
5.11 Maille en v au bord d'éjection . . . 116
5.12 vitesse de convergence et conditions aux limites . . . 119

6.1 Une interface perturbée et la vitesse induite . . . 126
6.2 Champ de vitesse (en bleu) dans le référentiel de la goutte pour $c_2 = 8$, quelques lignes de courants (en lignes fléchées) et interface (en noir) : le calcul est stable. 127
6.3 Champ de vitesse (en rouge) dans le référentiel de la goutte pour $c_2 = 9$ et interface (en noir) : le calcul est instable. . . . 127
6.4 Un problème de stabilité numérique : une interface initiale (ellipse verte) évolue sous l'influence de l'injection et la tension de surface est prépondérante. En noir sont données les interfaces aux temps $5\Delta t$, $10\Delta t$, $15\Delta t$ et $20\Delta t$. Les lignes verticales vertes sont les parois du canal. . . . 128
6.5 L'utilisation de la seule contrainte CFL, alors que la dynamique est pilotée par la tension de surface, induit des oscillations de l'interface autour d'une position "asymptotique", conduisant à l'immobilité de la goutte. . . . 128
6.6 Détermination de la vitesse de translation de la goutte (en trait noir, au centre du canal) : les flèches noires représentent la normale à l'interface ; les flèches bleues indiquent le vecteur $u_d\mathbf{U}$ constant (en différents endroits de l'interface) ; enfin, les parties de l'interface comprises dans les zones vertes en pointillés schématisent l'ensemble des points utilisés pour calculer la moyenne qui donne u_d. . . . 132
6.7 Zoom sur une goutte non confinée (ligne noire) dans un microcanal et le champ de vitesse global u (flèches bleues) associé, solution d'un problème de Stokes. De plus, on a superposé un cercle parfait pour constater la précision de la méthode (ligne rouge) . . . 135
6.8 Même simulation que la Figure 6.7 mais les flèches bleues représentent, ici, le champ de vitesse v dans le référentiel de la goutte. De plus, quelques lignes de courant (en noir avec de fléches) révèlent la dynamique de mélange au sein de la goutte. . . . 135

7.1 Interactions moléculaires (schématisées par des doubles-flèches noires et jaunes) pour une molécule complètement immergée dans le fluide A et pour une autre, située à l'interface. . . . 144
7.2 Illustration de la loi de Laplace pour une interface sphérique en équilibre. Le saut de pression p entre l'intérieur de la sphère et l'extérieur (on suppose que la pression y est nulle) est proportionnel aux rayons de courbure . . . 144
7.3 Un réseau de microcanaux en verre et PDMS . . . 145
7.4 Un réseau de microcanaux en verre et PDMS alimenté par différents fluides . . 146
7.5 Configuration "coflow" dans une jonction en Y, avec deux fluides miscibles. . . . 146

7.6 Configuration "flow focusing" utilisée par Anna *et al.* dans [10]. Dans le canal central, à gauche, est injectée de l'eau dont le jet se trouve pincé par l'arrivée latérale d'huile. Le mélange bifluide immiscible passe alors au travers du rétrécissement D pour se retrouver dans la cavité de droite (de largeur W). . . 147

7.7 Différents régimes d'émulsions mis à jour dans [10]. 148

7.8 Géométrie de canaux en croix. 148

8.1 Simulation d'une ellipse non confinée. En haut à gauche : interface initiale (en bleu) et les interfaces ultérieures (en noir) superposées. Images suivantes (de haut en bas, puis de gauche à droite) : les interfaces successives à $t = 1.7$, 3.4 et 17 ms qui montrent la convergence vers une forme asymptotique quasi circulaire. La même partie du canal est présentée sur toutes les figures. 151

8.2 Collision entre deux gouttes (en bleu) qui se rencontrent et fusionnent. La goutte unique obtenue se propage alors vers le bas dans le canal vertical. La séquence d'images est ordonnée de gauche à droite, puis de haut en bas. Les zones grisées matérialisent les parois solides. 152

8.3 Train de gouttes. La séquence d'images est ordonnée de gauche à droite, puis de haut en bas. Les zones grisées matérialisent les parois solides. Des gouttes sont injectées à la base du canal vertical, se déforment au contact du mur supérieur ou fusionnnent avec une goutte déjà présente puis s'évacuent par les canaux latéraux. 153

8.4 Géométrie en croix ou "flow focusing", pour créer des gouttes 154

8.5 Un jet 2D est toujours stable car une perturbation induit toujours une augmentation de la longueur de l'enveloppe, donc une situation énergétiquement défavorable 154

8.6 Un jet 3D peut être déstabilisé car il existe des configurations d'interface qui permettent de diminuer la surface de l'enveloppe conduisant à un état énergétique plus favorable. 154

8.7 Extension de la courbure bidimensionnelle. Les flèches bleues représentent les forces de tension de surface dans le plan de calcul. Les flèches vertes représentent la tension de surface dans le plan orthogonal 155

8.8 Interface initiale et configuration de l'écoulement 156

8.9 Simulation d'un jet microfluidique. A gauche : tension de surface 2D, le jet ne se casse pas. A droite : tension de surface 3D, des gouttes se forment. 157

8.10 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence 160

8.11 Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence 160

8.12 Quelques instantanés d'une expérience physique [31, 32] où l'on voit des microgouttes se former dans un canal en croix et se propager vers le haut. La séquence est ordonnée de gauche à droite puis de haut en bas. Les gouttes contiennent un colorant (couleur foncée, dans la moitié droite) qui se propage essentiellement dans la zone centrale et n'envahit pas l'avant de la goutte, mettant en évidence la zone morte frontale. 161

8.13 Quelques instantanés extraits du film d'une expérience physique [31, 32] où des microgouttes se déplacent de la droite vers la gauche (flèche rouge horizontale). La séquence est ordonnée de haut en bas puis de gauche à droite. Les gouttes contiennent des traceurs passifs (petits points sombres dans les gouttes) qui se déplacent dans le sens indiqué sur la courbe fermée rouge. Leurs trajectoires sont du même type que celles exhibées par les lignes de courants de la Figure 8.10. De plus, on observe que certains traceurs restent piégés à l'arrière de la goutte. 162
8.14 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que les viscosités dans la goutte et de la phase continue sont échangées. 163
8.15 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.1$ m/s 164
8.16 Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.1$ m/s 164
8.17 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.05$ m/s 165
8.18 Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.05$ m/s 165
8.19 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence hormis r_η qui passe de 2 à 10 (voir texte) 166
8.20 Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence hormis r_η qui passe de 2 à 10 (voir texte) 166
8.21 Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que la goutte a pour longueur $2.5D$ 167
8.22 Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que la goutte a pour longueur $2.5D$ et $u_{in} = 0.02$ m/s 167

9.1 Le domaine de calcul Ω peut contenir des obstacles solides Ω_s, qui sont alors traités à l'aide d'une méthode de pénalisation. 170
9.2 Géométrie axisymétrique. L'écoulement étant invariant par rotation autour de l'axe z, il suffit de considérer un plan (r, z) dans lequel on a représenté une ligne de courant et un vecteur vitesse caractérisé par deux composantes (u_r, u_z). . . . 170
9.3 Goutte dans un canal cylindrique : (a) géométrie réelle et (b) domaine de calcul utilisé. 171
9.4 Création de goutte avec deux canaux cylindriques coaxiaux : (a) géométrie réelle et (b) domaine de calcul utilisé. 172
9.5 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence 176

9.6 Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence . . . 176
9.7 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.1$ m/s . . . 177
9.8 Grande goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.1$ m/s . . . 177
9.9 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.05$ m/s . . . 178
9.10 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que les viscosités dans la goutte et de la phase continue sont échangées. . . . 178
9.11 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence hormis r_η qui passe de 2 à 10 (voir texte). . . . 179
9.12 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $u_{in} = 0.05$ m/s et $\rho_1 = \rho_2 = 0$. A comparer à la Figure 9.9 pour constater que l'inertie est négligeable dans ces configurations asymptotiques. 179
9.13 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $f = 4.10^{-2}$. . . . 180
9.14 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $f = 10^{-2}$. . . . 180
9.15 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $f = 5.10^{-3}$ . . . 181
9.16 Petite goutte (trait noir), champ de vitesse associé dans le référentiel de la goutte (flèches bleues) et quelques lignes de courant (lignes fléchées) ; données de référence sauf que $f = 10^{-3}$ . . . 181
9.17 Géométrie avec un injecteur (rectangle en gris) utilisée pour créer des gouttes. L'interface (en trait noir épais) est représentée avec le champ de vitesse associé (flèches bleues). . . . 183
9.18 Zoom sur la zone de l'injecteur de la Figure 9.17. Les vitesses calculées dans le solide, par la méthode de pénalisation sont négligeables par rapport à celle dans le fluide. . . . 184
9.19 Double Poiseuille imposé sur le bord d'injection, en $z = 0$. Une vitesse nulle est affectée dans la zone solide correspondant à l'injecteur. . . . 184
9.20 Développement d'un jet. Temps de référence . . . 185
9.21 Développement d'un jet. Temps de référence + 0.5 ms. . . . 185
9.22 Développement d'un jet. Temps de référence + 0.8 ms. . . . 185
9.23 Développement d'un jet. Temps de référence + 1.1 ms. . . . 186
9.24 Développement d'un jet. Temps de référence + 1.3 ms. Rupture du jet et création de la goutte entre les Figures 9.23 et 9.24. . . . 186
9.25 Développement d'un jet. Temps de référence + 1.6 ms. . . . 186

9.26 Développement d'un jet. Temps de référence + 1.9 ms. 187
9.27 Développement d'un jet. Temps de référence + 4.5 ms. 187
9.28 Développement d'un jet. Temps de référence + 98 ms. 187
9.29 Champ de pression (en couleurs), champ de vitesse (flèches noires) et quelques lignes de courants (en trait noir épais), à l'instant "Temps de référence + 4.5 ms". 188
9.30 Comparaison entre simulation (Courbe bleu) et expérience, d'après une photo de P. Guillot. Voir texte pour les données physiques respectives. 188
9.31 Création de la goutte autour de "Temps de référence + 1.3 ms". 189

Liste des tableaux

3.1 Etude de convergence ENO1 : translation du cercle simple 50
3.2 Etude de convergence ENO1 : rotation du cercle simple 50
3.3 Etude de convergence ENO1 : problème de Zalesak 50
3.4 Etude de convergence ENO2 : translation du cercle simple 54
3.5 Etude de convergence ENO2 : rotation du cercle simple 54
3.6 Etude de convergence ENO2 : problème de Zalesak 54
3.7 Etude de convergence ENO3 : rotation du cercle simple 58
3.8 Etude de convergence ENO3 : problème de Zalesak 58
3.9 Etude de convergence WENO5 : translation du cercle simple 62
3.10 Etude de convergence WENO5 : rotation du cercle simple 62
3.11 Etude de convergence WENO5 : problème de Zalesak 62
3.12 Variations de volume avec le schéma WENO5 67

5.1 Synthèse des conditions aux limites des cas-test 118

7.1 Des échelles humaines au nanomonde, en passant par les territoires micrométriques. * = voir texte. 140

Contributions

Les travaux réalisés dans cette thèse ont conduit à la publication d'articles et à des présentations orales dans diverses conférences. Les références afférentes sont précisées ci-dessous.

Articles

Revues internationales avec comité de lecture

Cédric Galusinski, Paul Vigneaux. Level-Set method and stability condition for curvature-driven flows. C. R. Acad. Sci. Paris, Sér. I., Vol 344, No 11, pp 703-708. 2007.

Cédric Galusinski, Paul Vigneaux. On stability condition for bifluid flows with surface tension : application to microfluidics. Journal of Computational Physics. 227 :12, 6140-6164. 2008.

Paul Vigneaux. An axisymmetric Level Set method for microdroplets hydrodynamics. Soumis, 2007.

Actes de Congrès internationaux avec comité de lecture

Paul Vigneaux, Droplets in microchannels with Level Set method, Proceedings ECCOMAS CFD 2006, 2006. Editors : P. Wesseling, E. Oñate, J. Périaux.

Paul Vigneaux, Level Set method for Curvature-driven Flows in Microfluidics, Proceedings ICCFD4, 2006. Springer, to appear.

C.-H. Bruneau, T. Colin, C. Galusinski, S. Tancogne, P. Vigneaux. Simulations of 3D Dynamics of Microdroplets : A Comparison of Rectangular and Cylindrical Channels. Proceedings ENUMATH 2007. Springer, to appear.

Acte de congrès national avec comité de lecture

Annie Colin, Galder Cristobal, Cédric Galusinski, Khodor Khadra, Paul Vigneaux. Écoulement de gouttes dans des microcanaux : simulations numériques et expériences. Actes du 18e CFM. 2007.

Communications orales

Conférences ou Workshops internationaux avec comité de lecture

Paul Vigneaux, Numerical modelling of droplet hydrodynamics in microchannels, 1^{st} French-Chinese Symposium on Microfluidics, October 29 - November 2, 2007, Institute of Mechanics

CAS - Beijing, China.

Paul Vigneaux, Exploring mixing dynamics inside microdroplets with a Level Set method, ENUMATH 2007, September 10 - 14, 2007, Graz, Austria.

Paul Vigneaux, Cédric Galusinski, A new stability condition for surface tension driven flows, ICIAM 07, July 16 - 20, 2007, **invitation au Minisymposium "Level set methods : Fluid Applications", organisé par Y. Tsai, F. Gibou et S. Osher**.

Cédric Galusinski, Paul Vigneaux, Surface tension-driven flows in Microfluidics, ICIAM 07, July 16 - 20, 2007.

Paul Vigneaux, About stability condition for bifluid flows with surface tension, Second Workshop of the DFG - CNRS research unit 563 : "Micro-Macro Modelling and Simulation of Liquid-Vapour Flows" - Talence, France, January 10 - 12, 2007.

Paul Vigneaux, Droplets in microchannels with Level Set method, ECCOMAS CFD 2006 - Egmond aan Zee, The Netherlands, September 5 - 8, 2006.

Cédric Galusinski, Khodor Khadra, Paul Vigneaux, Level Set method for bifluid flows in microchannels, WCCM VII - Hyatt Regency Century Plaza Hotel, Los Angeles, California, July 16 - 22, 2006.

Paul Vigneaux, Level Set method for Curvature-driven Flows in Microfluidics, ICCFD4 - Conference Center "Het Pand", Ghent, Belgium, July 10 - 14, 2006.

Congrès ou workshops nationaux avec comité de lecture

Annie Colin, Galder Cristobal, Cédric Galusinski, Khodor Khadra, Paul Vigneaux, Écoulement de gouttes dans des microcanaux : simulations numériques et expériences, 18e Congrès Français de Mécanique, Grenoble, France, 27 - 31 Août, 2007, présentation orale.

Paul Vigneaux, Stabilité numérique en suivi d'interface avec prépondérance de la tension de surface, Congrès national de mathématiques appliquées et industrielles - Praz sur Arly, 4 - 8 juin 2007, présentation orale.

Paul Vigneaux, Dynamique de gouttes en microcanaux : simulations et expériences, Workshop annuel SAFO (Systèmes Avancés à base de Fluides Organisés), ENSCPB, Bordeaux. 10-11 mai 2007.

Paul Vigneaux, Méthode Level Set pour des écoulements en microcanaux, CANUM 2006 - Beg er Lenn, Guidel, Morbihan, 29 mai - 2 juin 2006. **Poster récompensé par le Premier Prix**.

Résumé

Ce travail est consacré à la modélisation d'écoulements de deux fluides immiscibles et son application en microfluidique. Pour cela, nous mettons en oeuvre des méthodes Level Set actuelles permettant un suivi précis de l'interface, dont le mouvement est induit par des champs de vitesse vérifiant les équations de Stokes ou de Navier-Stokes munies d'un terme de tension de surface.

Dans une première partie, nous abordons la problématique du suivi d'interface et présentons en détail les composantes de la méthode Level Set. En particulier, nous détaillons les approches ENO et WENO pour discrétiser les équations de Hamilton-Jacobi ainsi que les diverses méthodes existantes de redistanciation.

Dans la deuxième partie, nous traitons de l'analyse et de la résolution numérique des écoulements bifluides incompressibles pilotés par la tension de surface. Après avoir décrit les modèles mathématiques ainsi que leurs discrétisations et solveurs, nous apportons une contribution nouvelle en dérivant théoriquement une condition de stabilité valable pour les nombres de Reynolds faibles à modérés, caractéristiques des configurations microfluidiques. De plus, on introduit une méthode de décomposition de l'écoulement qui permet de diminuer les temps de simulation.

Enfin, la troisième partie est consacrée à l'application des outils évoqués précédemment pour simuler la dynamique de gouttes dans des microcanaux. Nous présentons les résultats numériques obtenus avec d'une part, un code bidimensionnel cartésien et d'autre part, avec un code tridimensionnel axisymétrique que nous avons entièrement développés. Une bonne adéquation est obtenue relativement aux expériences microfluidiques du laboratoire LOF (Rhodia - CNRS). En particulier, avec nos simulations, nous mettons à jour différentes dynamiques de mélange au sein des gouttes.

Mots-clés : suivi d'interface, microfluidique, Level Set, Navier-Stokes incompressible, bifluide, tension de surface, condition de stabilité, gouttes, dynamique de mélange

---

Level Set methods for interface problems in Microfluidics

Abstract

This dissertation is dedicated to the numerical simulation of immiscible bifluid flows and its application to Microfluidics. To this end, we use a Level Set approach coupled to the resolution of Stokes or Navier-Stokes equations with surface tension.

The first part describes some numerical methods developed to follow evolving interfaces and then puts a special emphasis on the tools of the Level Set method. In particular, we detail ENO and WENO discretizations of Hamilton-Jacobi equations and existing methods for reinitialisation.

In the second part, we focus on the numerical analysis and resolution of surface tension - driven immiscible bifluid flows. We begin by the presentation of mathematical models, discretisations and solvers of the flow. We then derive theoretically a new stability condition induced by surface tension, for low and medium Reynolds numbers where stabilized interfaces can occur. We further introduce a splitting method which allows to decrease simulation time.

Finally, in the third part, we gather all tools presented previously and numerically simulate droplets hydrodynamics in microchannels. We present numerical results of two codes we entirely developed : a two-dimensional cartesian code and a three-dimensional axisymetric code. We compare our results with physical experiments conducted by the LOF laboratory (Rhodia - CNRS) and observe a good agreement. Particularly, we numerically bring to the fore new mixing dynamics inside microdroplets.

Keywords : interface capturing, Microfluidics, Level Set, incompressible Navier-Stokes, bifluid, surface tension, stability condition, droplets, mixing dynamics