


# THÈSE

**En vue de l'obtention du**

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

**Délivré par :**

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

**Discipline ou spécialité :**

Dynamique des fluides

---

**Présentée et soutenue par :**

Mme LUCIA RUEDA VILLEGAS

le mardi 10 décembre 2013

**Titre :**

SIMULATION NUMERIQUE DIRECTE DE L'EFFET LEIDENFROST.

---

**Ecole doctorale :**

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

**Unité de recherche :**

Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (I.M.F.T.)

**Directeur(s) de Thèse :**

M. DOMINIQUE LEGENDRE

M. SÉBASTIEN TANGUY

**Rapporteurs :**

M. CHRISTOPHE JOSSERAND, UNIVERSITE DE PARIS 8

M. FRANÇOIS XAVIER DEMOULIN, UNIVERSITE DE ROUEN

**Membre(s) du jury :**

M. FREDERIC GIBOU, UNIVERSITY OF CALIFORNIA SANTA BARBARA, Président

M. DOMINIQUE LEGENDRE, INP TOULOUSE, Membre

M. FABRICE LEMOINE, INP DE NANCY, Membre

M. PHILIPPE VILLEDIEU, ONERA TOULOUSE, Membre

M. SÉBASTIEN TANGUY, UNIVERSITE TOULOUSE 3, Membre

*À la mémoire de Titon et de mes grands-parents :*
*Mélida, Jairo, Mamu et Alberto*

*Dígalo, dígalo sin miedo ;*
*tal como va el mundo*
*todos los que no somos imbéciles*
*necesitamos estar un poco locos.*
A. Casona

**Résumé :**

Lorsqu'une goutte impacte une surface chaude dont la température est bien plus élevée que la température d'ébullition du liquide, une couche de vapeur se forme et elle lévite au dessus de la surface : ce phénomène est appelé « Effet Leidenfrost ». Dans cette étude, un nouvel algorithme permettant de modéliser les régimes d'évaporation et d'ébullition à l'interface liquide/gaz a été développé. En effet, dans certaines situations où les conditions thermodynamiques à l'interface sont très hétérogènes, la distinction entre les régimes d'évaporation et d'ébullition n'est pas toujours possible. C'est le cas de l'impact d'une goutte sur une surface chaude en régime de Leidenfrost. Dans ce cas, l'ébullition se produit dans le film de vapeur saturée piégé entre la goutte et la paroi, tandis que sur le dessus la goutte s'évapore au contact de l'air ambiant. De ce fait, l'ébullition et l'évaporation peuvent survenir simultanément dans différentes régions de la goutte. Les méthodes numériques classiques ne sont pas en mesure de prendre en compte ce régime transitoire. Par conséquent, un nouvel algorithme a été développé pour y parvenir. Cet algorithme a été utilisé pour simuler le rebond d'une goutte axisymétrique en régime de Leidenfrost. Les résultats sont ensuite comparés à des données expérimentales.

**Mots clés :** Effet Leidenfrost, Goutte, Vaporisation, Simulation Numérique Directe, Ghost Fluid, Level Set

**Direct Numerical Simulation of the Leidenfrost effect**

**Abstract :** When a liquid droplet impacts on a heated surface at a temperature much higher than the liquid's boiling point, it floats above the surface due to a vapor layer formation : this phenomenon is called the Leidenfrost effect. In this study, we propose a novel numerical method which allows dealing both with evaporation and boiling regimes at the interface between a liquid and a gas. Indeed, in some specific situations involving very heterogeneous thermodynamic conditions at the interface, the distinction between boiling and evaporation is not always possible. It can occur when a droplet impacts a hot surface in the Leidenfrost regime. In this case, boiling occurs in the film of saturated vapor which is entrapped between the bottom of the drop and the plate, whereas the top of the liquid droplet evaporates in the contact of the ambient air. Thus, boiling and evaporation occur simultaneously on different regions of the droplet when it impacts a heated surface. Usual numerical methods are not able to perform computations in this transient regimes, therefore, we propose in this study a new numerical method to achieve this challenging task. This algorithm is used to simulate an axisymmetric impact of a liquid droplet in the Leidenfrost regime for different Weber numbers and the results of this simulations are compared with experimental data.

**Keywords :** Leidenfrost Phenomenon, Droplet, Vaporization, Direct Numerical Simulation, Ghost Fluid, Level Set

## Remerciements

Il est parfois difficile d'expliquer au « monde extérieur » l'investissement professionnel et personnel que représente une thèse. Peut-être parce que l'on s'attend à nous voir déambuler dans les salles de la faculté tel des fantômes incapables de s'en détacher, le sac à dos à l'épaule : d'éternels étudiants.

C'est avec naïveté que j'ai abordé ce monde et j'ai eu la chance d'être accueillie dans une équipe formidable et dynamique qui a grandement contribué à l'aboutissement de ce projet.

J'aimerais tout d'abord remercier Sébastien Tanguy, mon directeur de thèse, qui m'a guidée et supportée pendant ces quatre années. Tu n'as (presque) pas eu peur de proposer un sujet ambitieux et d'entendre dire « ça NaN » pendant 3 ans et 6 mois. On a tenu les délais et ça marche ! J'aimerais aussi te remercier sincèrement de m'avoir soutenue pendant les longues périodes difficiles : un vrai chef !

Mes remerciements s'adressent ensuite à Jacques Magnaudet et François Charru pour leur accueil au sein du laboratoire, et à Dominique Legendre de me renouveler sa confiance et me permettre de continuer dans le monde de la recherche avec un nouveau projet plein de promesses.

J'ai souligné le dynamisme de l'équipe interface car une bonne ambiance de travail est, à mon sens, essentielle au bon déroulement d'une thèse. La convivialité des personnes qui ont partagé ces 4 années a beaucoup compté pour moi. Je tiens donc à remercier l'ensemble de l'équipe Interface et particulièrement Marie-Hélène Manzato pour son aide précieuse avec les casses-tête administratifs qu'ont été la plupart de mes dossiers et sa patience en toutes circonstances, Patricia Ern pour les discussions plurilingues, Véronique Roig pour les discussions qui donnent faim, Frédéric Risso pour les débats sur tous les sujets le midi, Catherine Colin de m'avoir rendu visite à l'hôpital, Greg Ehses de nos discussions « éclairées » sur les mœurs colombiennes. Je souhaite également remercier l'équipe de l'atelier, Sébastien Cazin et André Rouch de leur gentillesse en toutes circonstances.

Je n'oublie pas l'équipe des doctorants/postDoc/Stagiaires qui m'a iniciée au squash, natation et tennis avec Thomas (Thoto) le coach sportif, Marie ma copine Roller Derby que j'ai abandonné en cours de route pour finir ma thèse, Roberta pour nos discussions/coups de gueule tôt le matin quand l'IMFT est encore désert et pour un certain voyage mythique à Barcelone, Chris des bons moments partagés, Mélanie de ton soutien, Cédric juste merci[10] (que dire de plus ?), Michael (Quand est-ce qu'on retourne en Californie ? il nous manque Las Vegas !), et tous les autres : Yuri, Agathe, Mauricio, Mathieu (DIVA team Power ! !), Jean lou, Jérôme, Joël, Mitlesh, Greg, Elise, Audrey, Nico, Aurianne, Eduardo, Marine... Une mention spéciale à mes co-bureau : Benji, j'espère pouvoir continuer à te battre au squash les week-end, Marco qui m'a appris l'importance de la pause café à 10h30 même en dernière année de thèse et Reneeeeeeee Gracias por hablar español conmigo, me hace tanta falta ! Enfin (et pas des moindres) merci Motta de m'avoir soutenu toutes ces années, de m'avoir secouée quand il le fallait : en las buenas y en las malas, brother ! Merci Roland, le français « más latino que un latinoamericano ».

Je souhaite bien sûr remercier ma famille : ma mère qui a toujours pris soin de moi et qui a supporté mes sautes d'humeur parfois violentes pendant toutes ces années ; mon père, qui m'a enseigné cet humour ironique (parfois grinçant) caractéristique des Rueda-Villegas, l'amour de la musique, de la littérature et de la science. Ma sœur, éternelle complice (parfois rivale) que j'admire comme une grande soeur parce que c'est de nous deux la plus indépendante. Maxime, merci de m'avoir soutenu ces derniers mois difficiles où je n'avais que ma thèse en tête, de m'avoir appris à faire du vélo-cross en ville (on s'est fait peur ! !), de m'avoir poussée à ne plus (trop) procrastiner... bref, d'être toujours là dans les bons et les mauvais moments.

Je souhaite également remercier ma famille adoptive miossaise : Fabienne, qui ne m'a jamais lachée

malgré nos caractères de cochon et qui m'a fait découvrir la magnifique région Bordelaise, Yohann que j'ai vu grandir, Madelon pour la découverte de la gastronomie française, Titon pour ces fous rires et Corinne (j'attends toujours que tu viennes un week-end à Toulouse !).

J'adresse également mes sincères remerciements aux membres du jury qui ont accepté d'évaluer ce travail : Frédéric Gibou, d'avoir accepté de présider mon jury de thèse, Christophe Josserand et François-Xavier Démoulins les rapporteurs de ce manuscrit de leurs remarques constructives et enfin Fabrice Lemoine et Philippe Villedieu de leurs questions et commentaires éclairés.

Enfin, je souhaite remercier l'ANR IDHEAS qui a financé le projet et l'équipe IDHEAS pour les échanges scientifiques enrichissants et l'ambiance conviviale des réunions.

# Table des matières

**Liste des Abréviations** **1**

**1 L'effet Leidenfrost : Etat de l'art** **5**
1.1 L'effet Leidenfrost . . . 6
1.1.1 La température de Leidenfrost . . . 6
1.1.2 Goutte sessile . . . 7
1.2 Les régimes d'interaction goutte/paroi . . . 8
1.2.1 Régimes d'interaction sur paroi froide . . . 9
1.2.2 Regimes d'intéraction sur paroi chaude . . . 11
1.3 Paramètres controlant l'écoulement . . . 13
1.3.1 Effet du diamètre initial de la vitesse d'impact . . . 13
1.3.2 Effet d'autres paramètres moins influents *a priori* . . . 14
1.4 Simulation numérique du rebond de goutte . . . 18

**2 Méthodes numériques pour la simulation des écoulements diphasiques** **27**
2.1 Méthodes de localisation d'une interface entre fluides . . . 28
2.1.1 Généralités sur les méthodes permettant de localiser l'interface . . . 29
2.1.2 La méthode Level Set . . . 32
2.2 Méthode de Projection pour la résolution des équations de Navier-Stokes . . . 38
2.2.1 Méthode de Projection pour un écoulement monophasique . . . 39
2.2.2 Discrétisations spatiales pour la méthode de projection . . . 40
2.2.3 Critère de restriction du pas de temps . . . 44
2.3 Méthode de projection pour les écoulements diphasiques et traitement du terme visqueux 45
2.3.1 Prise en compte d'un terme source singulier comme une condition de saut à l'interface 46
2.3.2 Méthode Continuous Surface Force (CSF) . . . 48
2.3.3 Méthode « Ghost Fluid Primitive Viscous Method » . . . 49
2.3.4 Méthode « Ghost Fluid Conservative Viscous Method » . . . 51
2.3.5 Méthode « Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous Method » . . . 52
2.4 Discrétisation spatiale des méthodes numériques pour le terme visqueux . . . 52
2.4.1 Discrétisation spatiale de la méthode CSF . . . 53
2.4.2 Discrétisation spatiale de la méthode GFCVM . . . 56
2.4.3 Discrétisation spatiale de la méthode GFPVM . . . 57
2.4.4 Discrétisation spatiale de la méthode GFSCVM . . . 59
2.5 La méthode Ghost Fluid pour le traitement des conditions de saut . . . 60
2.5.1 Méthode Ghost Fluid 1D . . . 60
2.5.2 Généralisation multidimensionnelle de la méthode Ghost Fluid . . . 65
2.6 Validation de l'algorithme de résolution des écoulements diphasiques . . . 70
2.6.1 Bulles sphérique en ascension sous l'effet de la gravité . . . 71
2.6.2 Bulle en ascension dans un fluide visqueux à $Re_\infty = 20$ . . . 74

**3 Développements numériques pour l'évaporation et l'ébullition 77**
3.1 Equations de conservation de l'énergie et des espèces chimiques . . . 79
3.1.1 Equation de l'énergie . . . 79
3.1.2 Equation des espèces chimiques . . . 83
3.1.3 Relation thermodynamique et conditions de saut . . . 84
3.2 Algorithme de résolution des équations de l'énergie et des espèces chimiques . . . 88
3.2.1 Solveur thermique pour l'ébullition (GFTSB) . . . 90
3.2.2 Solveur thermique pour l'évaporation (GFTSE) . . . 92
3.2.3 Solveur thermique pour l'évaporation et l'ébullition (GFTSEB) . . . 94
3.3 Résolution spatiale des équations de l'énergie et des espèces chimiques . . . 96
3.3.1 Discrétisation de l'équation de la température dans un domaine irrégulier avec une condition de Dirichlet à l'interface . . . 96
3.3.2 Résolution spatiale sur un domaine 2D de l'équation de conservation des espèces munie d'une condition de Robin à l'interface . . . 98
3.3.3 Calcul géométrique de volumes et surfaces . . . 100
3.4 Techniques d'extrapolation et calcul du taux de changement de phase . . . 105
3.4.1 Technique d'extrapolation multidimensionelle . . . 105
3.4.2 Calcul du débit de vaporisation lors d'un changement de phase . . . 111
3.5 Résolution des équations de Navier-Stokes avec un saut de vitesse . . . 112
3.5.1 Traitement implicite des termes visqueux en présence de changement de phase . . . 112
3.5.2 Extrapolation constante du champ de vitesses et extrapolation respectant la condition d'incompressibilité . . . 115
3.5.3 Transport de l'interface en présence de changement de phase . . . 115
3.6 Validation des modèles . . . 116
3.6.1 Commentaires sur le modèle thermodynamique utilisé . . . 116
3.6.2 Évaporation d'une goutte quasi-statique : loi de décroissance du diamètre . . . 116
3.6.3 Évaporation d'une goutte sphérique en mouvement . . . 118
3.7 Etude de l'évaporation d'une goutte sur une paroi chauffée au-delà de la température d'ébullition du liquide considéré . . . 123

**4 Simulation Numérique directe axisymétrique de l'impact d'une goutte sur une paroi chaude 129**
4.1 Impact d'une goutte à $We = 7.4$ . . . 129
4.2 Impact d'une goutte à $We = 25.2$ . . . 138
4.3 Impact d'une goutte à $We = 44.8$ . . . 145
4.4 Comparaison des résultats . . . 150

**5 Conclusion 161**

**A Résolution d'un système linéaire avec une décomposition LU 165**

**Bibliographie 167**

# Liste des Abréviations

$(u, v, w)$ Composantes de la vitesse suivant les directions $e_x$, $e_y$ et $e_z$ du repère cartésien

$(x, y, z)$ Coordonnées suivant les directions du repère cartésien $e_x$, $e_y$ et $e_z$

$[\ .\ ]_\Gamma$ Opérateur quantifiant le saut d'une variable à l'interface notée $\Gamma$

$\bar{\bar{\sigma}}$ Tenseur des contraintes en $Pa$

$\bar{\bar{\tau}}$ Tenseur des contraintes visqueuses en $Pa$

$\bar{\bar{D}}$ Tenseur des déformations en $s^{-1}$

$\bar{\bar{I}}$ Tenseur unité

$\Delta t$ Pas de temps $\Delta t = t^{n+1} - t^n$

$\Delta x_i$ Pas d'espace suivant la direction $\vec{e}_x$ $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$

$\Delta y_j$ Pas d'espace suivant la direction $\vec{e}_y$ $\Delta y_j = y_{j+1} - y_j$

$\Delta z_k$ Pas d'espace suivant la direction $\vec{e}_z$ $\Delta z_k = z_{k+1} - z_k$

$\dot{\omega}$ Débit de réaction en $kg.s^{-1}.m^{-2}$

$\dot{m}_i'''$ Gain ou perte de masse de l'espèce $i$ en $kg.s^{-1}.m^{-3}$

$\dot{Q}$ Puissance thermique en $W$

$\dot{W}$ Puissance mécanique en $W$

$\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t}$ Dérivée particulaire

$\frac{\partial}{\partial}$ Dérivée partielle

$\frac{d}{dt}$ Opérateur de dérivée totale

$\Gamma$ Surface qui représente l'interface entre deux fluides

$\gamma$ Rapport entre les capacités thermiques massiques isobare et isochore

$\mathcal{V}$ Nombre de moles de l'espèce $i$ en $m^{-3}$

$\mu$ Viscosité dynamique en $kg.m^{-1}.s^{-1}$

$\nabla\ .$ Opérateur de divergence

$\nabla$ Opérateur gradient

$\Omega$ Domaine de calcul

$\Omega_{i,j,k}$ Maille 3D centrée au point $(x_i, y_j, z_k)$

$\Omega_{i,j}$ Maille 2D centrée au point $(x_i, y_j)$

| | |
|---|---|
| $\partial\Omega$ | Bords du domaine $\Omega$ |
| $\partial\Omega_{i,j,k}$ | Bords de la maille 3D centrée au point $(x_i, y_j, z_k)$ |
| $\partial\Omega_{i,j}$ | Bords de la maille 2D centrée au point $(x_i, y_j)$ |
| $\phi_d$ | Fonction de dissipation en $W.m^{-3}$ |
| $\rho$ | Masse Volumique du fluide en $kg.m^{-3}$ |
| $\rho_0$ | Densité de référence en $kg.m^{-3}$ |
| $\rho_i$ | Masse volumique de l'espèce $i$ en $kg.m^{-3}$ |
| $\vec{\varphi}^{cond}$ | Conduction thermique en $W.m^{-2}$ |
| $\vec{g}$ | Acceleration de la pesanteur en $m.s^{-2}$ |
| $\vec{n}$ | Normale unitaire extérieure |
| $\vec{V}$ | Vitesse en $m.s^{-1}$ |
| $A^n$ | Valeur de A au temps $t = \sum_{i=1}^{n} \Delta t$ |
| $A^\Gamma$ | Valeur de la variable A sur l'interface |
| $A_{i,j,k}$ | Valeur de A au point $(x_i, y_j, z_k)$ |
| $A_{i,j}$ | Valeur de A au point $(x_i, y_j)$ |
| $C_p$ | Capacité thermique à pression constante en $J.K^{-1}.kg^{-1}$ |
| $D$ | Norme de la vitesse $\vec{W}$ en $m.s^{-1}$ |
| $d\Omega$ | Unité infinitésimale de volume |
| $D_m$ | Coefficient de diffusion massique en $m^2.s^{-1}$ |
| $dS$ | Unité infinitésimale de surface |
| $e$ | Énergie interne massique en $J.kg^{-1}$ |
| $E_c$ | Nombre de Eckert |
| $h$ | Enthalpie massique en $J.kg^{-1}$ |
| $h_0$ | Enthalpie par unité de masse à une température de référence $T_0$ en $J.kg^{-1}$ |
| $h_{lg}$ | Chaleur latente de vaporisation à la pression atmosphérique $h_{lg} = 2,3.10^6 J.kg^{-1}$ |
| $J_i$ | Vecteur flux diffusif de masse de l'espèce $i$ en $kg.s^{-1}.m^{-2}$ |
| $k$ | Conductivité thermique en $W.m^{-1}.K^{-1}$ |
| $L_0$ | Longueur de référence en $m$ |
| $M$ | Nombre de Mach |
| $M_i$ | Masse molaire de l'espèce $i$ en $kg.mol^{-1}$ |

$m_i$ Masse de l'espèce $i$ en $kg$

$n_i$ Nombre de moles de l'espèce $i$ en $mol$

$P$ Pression en $Pa$

$P_0$ Pression de référence en $Pa$

$P_i$ Nombre de moles de l'espèce $i$ en $Pa$

$P_{atm}$ Pression atmosphérique moyenne au niveau de la mer $P_{atm} = 1,013.10^5 Pa$

$P_{l,g}$ Pression du liquide ou du gaz en $Pa$

$P_{rod}$ Production volumique d'énergie thermique en $W\ .\ m^{-3}$

$Pr$ Nombre de Prandtl

$R$ Constante universelle des gaz parfaits en $R = 8,3144621 J.mol^{-1}.K^{-1}$

$Re$ Nombre de Reynolds

$S$ Valeur de la vitesse de vaporisation du liquide en $m.s^{-1}$

$T$ Température en $K$

$t$ Temps en $s$

$T^B$ Température d'ébullition en $K$

$T_0$ Température de référence en $K$

$T_i^{sat}(P_i)$ Température de saturation de l'espèce $i$ à la pression $P_i$ en $K$

$T_p$ Température de référence en $K$

$T_s$ Température sur l'interface en $K$

$T_{l,g}^{\Gamma}$ Température du liquide ou du gaz à l'interface en $K$

$U$ Énergie interne d'un système

$U_0$ Vitesse de référence en $m.s^{-1}$

$V_i$ Vitesse de l'espèce $i$ en $m.s^{-1}$

$V_n$ Valeur de la vitesse normale en $m.s^{-1}$

$Y_i$ Fraction massique de l'espèce $i$

Chapitre 1

# L'effet Leidenfrost : Etat de l'art

**Sommaire**


**1.1 L'effet Leidenfrost . . . . . 6**
1.1.1 La température de Leidenfrost . . . . . 6
1.1.2 Goutte sessile . . . . . 7
**1.2 Les régimes d'interaction goutte/paroi . . . . . 8**
1.2.1 Régimes d'interaction sur paroi froide . . . . . 9
1.2.2 Regimes d'intéraction sur paroi chaude . . . . . 11
**1.3 Paramètres controlant l'écoulement . . . . . 13**
1.3.1 Effet du diamètre initial de la vitesse d'impact . . . . . 13
1.3.2 Effet d'autres paramètres moins influents *a priori* . . . . . 14
**1.4 Simulation numérique du rebond de goutte . . . . . 18**


Force est de constater que les problèmes liés à la consommation grandissante d'énergie sont au cœur des débats scientifiques, écologiques et politiques de ces dernières années. La compréhension des phénomènes de transferts thermiques et de changements de phases s'inscrit naturellement dans ce cadre et la présente étude se veut une contribution à une meilleure compréhension de ce sujet.

Cette étude porte sur l'interaction d'une goutte avec une paroi très chaude. De nombreuses études ce sont intéressées aux interactions entre les gouttes et les parois chaudes ou froides pour en avoir une meilleure maîtrise.

Ces phénomènes ont, de plus, de nombreuses applications industrielles, environnementales et domestiques. L'interaction des gouttes avec des parois froides se manifeste notamment lors de la pulvérisation de gouttes de peinture sur un mur, l'interaction des gouttes de pluie avec le pare-brise d'un véhicule, un jet d'encre dans une imprimante ou l'inhalation de sprays dans le domaine médical.

En ce qui concerne les interactions avec des parois chaudes, l'injection de sprays de carburant dans une chambre à combustion ou le refroidissement de plaques de métaux par sprays font partie des plus importantes applications industrielles.

L'objectif de ce chapitre est de présenter un état de l'art sur l'effet Leidenfrost en recensant les études qui portent sur ce sujet. Le phénomène de Leidenfrost est décrit dans la première partie ainsi que la notion de « température de Leidenfrost ». Les études concernant les gouttes sessiles font également l'objet de cette partie.

Les études concernant les régimes d'interaction entre des gouttes et des parois froides et des gouttes et des parois chaudes sont ensuite présentées dans la deuxième partie. La classification des régimes en fonction du nombre de Mundo $K$ et de la température adimensionnée $T^*$ qui en découle permet de conclure cette partie.

Les paramètres qui ont une influence sur le comportement thermodynamique et hydrodynamique des gouttes sont identifiés ainsi que les études qui portent sur l'effet de ces paramètres. Finalement, les études numériques de l'interaction d'une goutte avec une paroi chaude sont présentées.

## 1.1 L'effet Leidenfrost

Cette étude porte sur la lévitation de gouttes sur des parois très chaudes. Ce phénomène est appelé « Effet Leidenfrost » en l'honneur du médecin allemand *Johann Gottlob Leidenfrost* qui le décrivit pour la première fois [60].

L'effet Leidenfrost est une manifestation mécanique des transferts thermiques et du changement de phase de la phase liquide qui impacte un solide. Lorsque la température de ce solide est supérieure à une certaine valeur $T_{Leid}$, une couche de vapeur se crée entre la goutte impactante et le solide empêchant ainsi un contact direct liquide/solide.

Ceci a pour effet de retarder l'évaporation de la goutte et de modifier les modes de transferts thermiques entre la goutte et la paroi. Quantifier ces changements et en identifier les raisons sont les objectifs des études citées dans ce chapitre.

Les premiers travaux sur l'effet leidenfrost se sont surtout concentrés sur la description de la forme des gouttes en fonction de certains paramètres identifiés dans la partie 1.3 et sur la détermination de la température de Leidenfrost notée $T_{Leid}$ qui fait l'objet du paragraphe suivant.

### 1.1.1 La température de Leidenfrost

La température de Leidenfrost est définie comme étant la température à laquelle le temps de vie de la goutte est le plus long.

Dans les anées 60, *Gottfried, Bell & Lee* [34, 35] ont étudié le cas de gouttes millimétriques de différents liquides tels que l'eau, le tétrachlorure de carbone, l'éthanol le benzène et le n-octane impactant une surface de plus en plus chaude. Pour tous les liquides autre que l'eau, ils ont déterminé $T_{Leid}$ comme étant $100K$ à $105K$ au dessus de la température de saturation du liquide notée $T^B$. Les auteurs ont également déterminé une particularité de l'eau : la température $T_{Leid}$ est bien supérieure aux autres dans le sens où l'écart entre $T_{Leid}$ et $T^B$ est plus important :

$$150K + T^B \ < \ T_{Leid} \ < \ 210K + T^B$$

D'après les auteurs, la température de Leidenfrost de l'eau semble dépendre de la surface utilisée et de la manière de déposer la goutte. De plus, elle ne dépend pas de la taille des gouttes dans la gamme de diamètres étudiée.

Cette dernière remarque est confirmée par l'étude de *Wang et al.* [105] qui prétend que la température de Leidenfrost est indépendante de la dynamique de l'impact. Dans leur article, *Wang et al.* introduisent le température $T_{dry}$ qui correspond à la température pour laquelle la goutte ne touche pas la paroi. Dans la plupart des travaux, il est souvent admis que $T_{dry} = T_{Leid}$ or si c'est vrai pour les impact pour lesquels le nombre de Weber $We \sim 0$, pour des impacts à plus grand $We$, $T_{dry} < T_{Leid}$. Ils en déduisent que les classifications des régimes liés aux transfert thermiques ne sont pas les mêmes que les régimes dynamiques (*Cf.* Fig. 1.1).

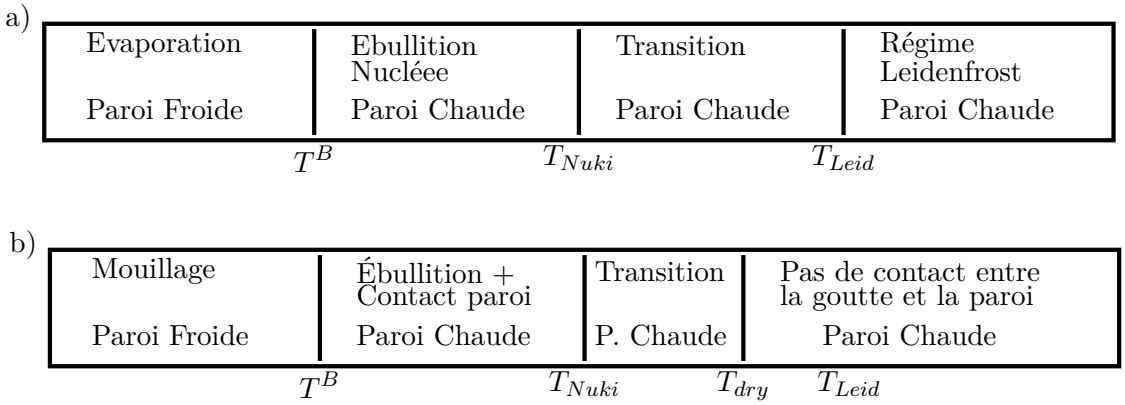



FIGURE 1.1 – Classification des régimes d'impact en fonction des transferts thermiques (a) et des régimes dynamiques de l'impact (b) d'après *Wang et al.*

La température de Nukiyama $T_{Nuki}$ correspond à la température à laquelle la durée de vie de la goutte est la plus courte et le débit de vaporisation est maximal.

En 2003, *Biance et al.* [6] recensent les études concernant la température de Leidenfrost et déduisent qu'elle dépend de la rugosité, des propriétés du liquide et de la façon de déposer la goutte.

Finalement, *Gradeck et al.* [36] constatent que contrairement à ce qui est avancé par *Wang et al.* la température de Leidenfrost dépend de la dynamique de la goutte et des caractéristiques du liquide : plus le nombre de $We$ est élevé, plus $T_{Leid}$ est élevée.

Après avoir déterminé la température à partir de laquelle le régime Leidenfrost s'installe, les études se sont portées sur le cas des gouttes sessiles qui sont déposées sur la paroi et qui lévitent sur la couche de vapeur.

### 1.1.2 Goutte sessile

Ce sont également *Gottfried, Bell & Lee* [34, 35] qui réalisent des études pionnières sur les gouttes sessiles. Ils suggèrent que les transferts radiatifs constituent une source de chaleur importante à prendre en compte dans le bilan thermique. Ils supposent que les transferts de chaleur sont dus à la conduction et à la radiation dans la partie inférieure de la goutte et essentiellement aux effets radiatifs dans la partie supérieure. Cette dernière source de chaleur n'est pas prise en compte dans cette thèse puisqu'une étude du flux radiatif sous la goutte a montré qu'il était très petit par rapport au flux conductif au moment de l'impact.

Les auteurs avancent également que le taux de vaporisation sur le dessus de la goutte n'est pas négligeable. Cette hypothèse est également retenue par *Zhang & Gogos* [110] dans les années 90. Dans leur étude analytique de gouttes sessiles millimètriques d'eau et d'$n$-heptane, ils constatent que la température sur la surface de la goutte varie en fonction de la position (contrairement à l'hypothèse de *Gottfried, Bell & Lee*) et du temps. Elle est fonction de la distance la séparant de la paroi, de l'épaisseur de film et du type de liquide. Cette variation de température s'estompe si la paroi est plus chaude.

En 2003, *Biance et al.* [6] ce sont également intéressés aux goutte sessiles en décrivant les formes des gouttes en fonction de leur rayon et ont effectué une loi d'echelle pour caractériser la durée de vie des gouttes.

Contrairement à ce qui a été avancé par *Zhang & Gogos*, *Biance et al.* prétendent que l'épaisseur de film diminue en fonction du temps. Le modèle mathématique de *Myers & Charpin* [70] donne des résultats comparables aux expériences réalisées par *Biance et al.* et semble confirmer cette hypothèse.

Cependant, des études plus récentes réalisées par *Pomeau et al.* [78] et *Celestini et al.* [12] confirment le phénomène dit de « take off » observé par *Zhang & Gogos* lorsque la goutte devient très petite. En effet, lorsque le rayon de la goutte atteind une valeur critique $R_l$, elle décolle de la paroi.

Cette donnée leur a permis de définir 4 régimes de formes de gouttes (*Cf.* Fig. 1.2) en fonction des valeurs critiques de take off, intermédiaire et longueur capillaire $R_l$, $R_i$ et $R_c$ définies ci-dessous :

$$R_l = \sqrt[3]{\frac{\mu\ \delta T\ \lambda}{g\ L\ \rho_{vap}\ \rho_l}} \tag{1.1}$$

$$R_c = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l\ g}} \tag{1.2}$$

$$R_i = \left(R_l^3\ R_c^4\right)^{\frac{1}{7}} \tag{1.3}$$

Où $\mu$ est la viscosité, $\delta T$ la différence de température entre la goutte et la paroi, $\lambda$ la conductivité thermique, $g$ l'accélération de la gravité, $L$ la chaleur latente de vaporisation, $\rho_{vap}$ et $\rho_l$ les masses volumiques de la vapeur et du liquide et $\sigma$ le coefficient de tension de surface.

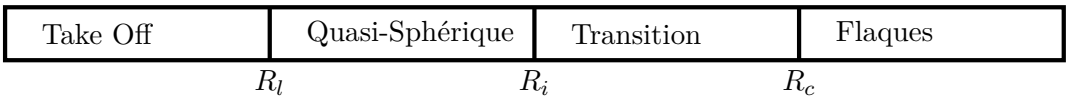



FIGURE 1.2 – Classification des formes des gouttes sessiles en fonction de leur rayon d'après *Celestini et al.* et *Pomeau et al.*

Une fois étudiés les cas des gouttes sans vitesse initiale, l'intêret des auteurs se porte sur les régimes d'interaction entre les gouttes ayant une vitesse d'impact non nulle et une paroi. Les régimes entre les gouttes et les parois froides font l'objet de la première partie et les régimes goutte/paroi chaude de la deuxième partie.

## 1.2 Les régimes d'interaction goutte/paroi

De nombreuses études expérimentales ont été réalisées pour identifier les paramètres qui caractérisent les régimes d'interaction entre des gouttes et des parois. Ces études portent généralement sur des gouttes et des trains de gouttes pour contrôler au mieux les conditions expérimentales et ainsi, pouvoir identifier clairement l'influence de chacun de ces paramètres.

Des études purement dynamiques ont été réalisées sur des parois dites « froides », dont la température est inférieure à la températude d'ébullition du liquide noté $T^B$. La température de paroi adimensionnée $T^*$ est fonction de $T^B$ et permet de différencier les parois « froides »pour lesquelles $T^* < 0$, des parois

« chaudes » pour lesquelles $T^* \geqslant 0$ :

$$T^* = \frac{T_w - T^B}{T_{Leid} - T^B} \tag{1.4}$$

Les résultats d'études sur la configuration gouttes/paroi froide, pour laquelle $T^*$ est négatif, sont présentés dans une première partie et les régimes d'interaction sur paroi dite « chaude » seront exposés ensuite.

### 1.2.1 Régimes d'interaction sur paroi froide

Deux régimes sont à distinguer pour les parois où $T^* < 0$ : le dépot et le splashing (ou éclatement). Les études de *Mundo et al* [69] ont montré que les effets visqueux, inertiels et de tension de surface contrôlent les régimes d'interaction goutte/paroi. Les nombres de Weber, Ohnesorge et Reynolds peuvent donc permettre de caractériser ces régimes.

1. Pour des nombres de Weber élevés, les auteurs observent un régime de splashing : lors de l'impact du train de gouttes, le liquide se répand sur la paroi et une couronne est formée dans la direction transversale. Cette couronne va peu à peu s'affiner et se destabiliser ce qui conduit à la création de gouttes secondaires.

2. Pour des nombres de Weber plus faibles l'énergie cinétique n'est pas assez élevée pour permettre la création de cette couronne et les forces visqueuses vont la dissiper. La goutte se dépose et s'étale donc sur la paroi : c'est le régime de dépôt.

Dans leur article, *Mundo et al.* font varier les paramètres qui controlent l'écoulement pour obtenir une loi permettant de délimiter ces deux régimes :

- Diamètre des gouttes incidentes : 60 $\mu m$ $\rightarrow$ 150 $\mu m$
- Vitesse des gouttes incidentes : 12 $m.s^{-1}$ $\rightarrow$ 18 $m.s^{-1}$
- Angle de contact : $4^o$ $\rightarrow$ $65^o$
- Viscosité : 1 $mPa.s$ $\rightarrow$ 2,9 $mPa.s$
- Tension de surface : 22 $mN.m^{-1}$ $\rightarrow$ 72 $mN.m^{-1}$
- Rugosités moyennes : $R_t = 2,8$ $\mu m$ et $R_t = 78$ $\mu m$

De cette étude, *Mundo et al.* obtiennent une corrélation en fonction du nombre de Walzel $\tilde{K}$ (1.5) délimitant les régimes de dépot et de splashing : pour des nombres $\tilde{K} < \tilde{K}_c = 57,7$ c'est un régime de dépôt et pour $\tilde{K} > \tilde{K}_c$ c'est un régime de splashing.

$$\tilde{K} = Oh\ Re^{1,25} \tag{1.5}$$

Les résultats de *Mundo et al.*, ceux de *Walzer* [104, 103] et ceux de *Schmidt et Knauss* [87] sont représentés dans la Fig. 1.3. En bleu sont représentés les expériences où un dépot a été observé et en rouge celles sous le régime de splashing. Ces mesures montrent la pertinence de la corrélation effectuée par *Mundo et al.*.

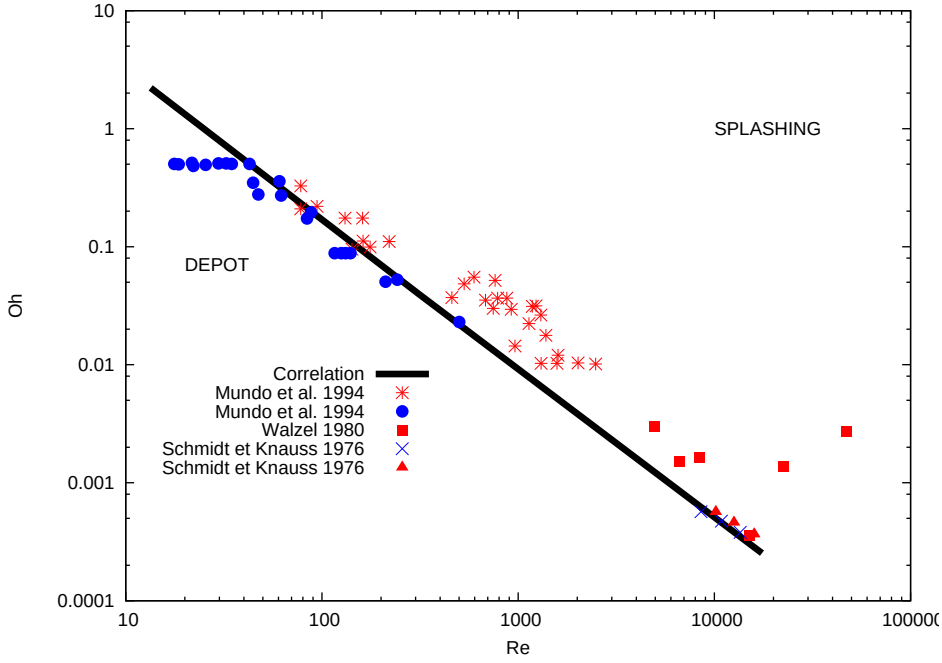



FIGURE 1.3 – Diagramme délimitant les 2 régimes d'interaction entre des gouttes et des parois froides : le dépot (en rouge) et le splashing (en bleu). Les résultats de *Mundo et al.* (• et ∗), de *Walzer* (▲) et de *Schmidt et Knauss* (■ et ×) sont représentés.

Les effets de la rugosité ont également été étudiés par *Mundo et al.* en utilisant deux types de surfaces : une paroi lisse (pour laquelle la hauteur $R_t = 2,8\mu m$) et une paroi plus rugueuse ($R_t = 78\mu m$). Ils ont observé que cet écart de rugosité n'affectait pas la valeur critique $\tilde{K}_c$ mais l'augmentation de la rugosité déformait fortement la couronne formée lors du splashing.

Les études pour les parois chaudes ont été effectuées en fonction du nombre de Mundo qui met en jeu le nombre Weber et le nombre de Ohnesorge :

$$K = We\ Oh^{-0,4} \tag{1.6}$$

Comme le montre la relation suivante trouvée par *Cossali et al.* [16], le nombre de Mundo est fonction du nombre de Walzel :

$$K = \tilde{K}^{1,6} \tag{1.7}$$

Le critère de *Mundo et al.* pour séparer les régimes de dépôt et splashing d'un train de gouttes impactant un film liquide sur une paroi froide peut également s'exprimer en fonction de cet autre nombre adimentionnel : $K_c = 657$.

D'autres études sur paroi sèche obtiennent une autre valeur critique :

- *Marengo & Tropea* [65] : $K_c = 2074$
- *Samenfink* [84] : $K_c = 1444$
- *Stow & Hadfield* [93] : $K_c = 1320$
- *Dewitte* [19] : $K_c = 3000$

### 1.2.2 Regimes d'intéraction sur paroi chaude

Dans le cas des parois chaudes se distinguent trois régimes d'interaction : le dépôt, le splashing et le rebond. Ce dernier régime de rebond sec (sans ligne triple) est très rare dans le cas des parois froides et il est intimement lié aux effets thermiques et aux changements de phase dans le cas des parois chaudes.

Certes les frontières délimitant les domaines dépendent quelque peu des conditions expérimentales et de la précision des mesures, mais elles sont également subjectives dans le sens où la définition des régimes peut être différente d'un auteur à un autre. En effet, la transition n'est pas drastique et il convient de définir la frontière entre deux régimes afin de les délimiter correctement. *Dewitte* [19] et *Dunand* [20] définissent le splashing lorsque la première goutte secondaire apparait après l'impact d'une goutte. Reste à distinguer les gouttes secondaires du régime de splashing avec les gouttes satellites du régime de rebond qui se forment lors du « décollement » de la paroi lorsque la goutte s'étire et que la tension de surface n'est pas assez forte pour garder la cohésion.

Dans le diagramme 1.4 sont présentés les expériences réalisées à l'université de WÜK , les résultats de *Samenfink et al.* [84] de l'université de l'ITS de Karlsruhe et ceux de *Dewitte* qui a réalisé les frontières entre les différents régimes. Les simulations effectuées dans la présente étude ont également été situées dans ce graphe.

Les couleurs correspondent aux différents régimes observés : en bleu le dépôt des gouttes et la formation éventuelle d'un film liquide, en rouge le splashing et en noir le régime de dépôt. Les données confirment la pertinence des frontières effectuées par *Dewitte* puisque mis à part quelques points, les observations correspondent aux données théoriques.

Le cas des parois froides correspond à la région où $T^* < 0$. Dans la partie précédente a été évoquée le critère délimitant les deux régimes : $K_c = 3000$ et cette délimitation est représentée dans le diagramme en termes de $log(K)$ en fonction de $T^*$.

Deux configurations sont à distinguer pour les parois chaudes : le cas où la température de la paroi $T_w$ est comprise entre la température d'ébullition du liquide $T^B$ et la température de Leidenfrost $T_{Leid}$ ($0 \leqslant T^* < 1$) et le cas où la température $T_w$ dépasse $T_{Leid}$.

Dans le premier cas, outre les deux régimes des parois froides apparait le régime de rebond, où la goutte s'étale sur la paroi puis la tension de surface la force à se recompacter pour ensuite décoller.

Dans le deuxième cas, les deux régimes existant sont les mêmes que pour les parois froides. Lorsque la température de la paroi dépasse la température de Leidenfrost, la couche de vapeur qui se crée sous la goutte empêche le contact de celle-ci avec la paroi. Le régime de rebond est donc non mouillant.

L'objectif principal de la thèse de *Dewitte* est la modélisation des différents régimes d'impact et de créer une classification de ces régimes. D'après *Dewitte* l'équation de la frontière délimitant le régime de splashing s'écrit :

$$\begin{cases} K_s = K_c & \text{si } T^* < 0 \\ K_s = K_c + (K_{Leid} - K_c)\dfrac{T^*}{T^*_{lim}} & \text{si } 0 \leqslant T^* < T^*_{lim} \\ K_s = K_{Leid} & \text{si } T^* \geqslant T^*_{lim} \end{cases} \tag{1.8}$$

Les frontières délimitant le régime de rebond s'écrivent :

$$\begin{cases} K_r = K_{Leid} & \text{si } T^* \geqslant T^*_{lim} \\ K_r = \max\left(K_{c_2}; K_{Leid}\left(\dfrac{T^*}{T^*_{lim}}\right)^2\right) & \text{si } 0 \leqslant T^* < T^*_{lim} \end{cases} \tag{1.9}$$

Les constantes déterminées par *Dewitte* sont les suivantes :

$$K_c = 3000 \tag{1.10}$$
$$K_{Leid} = 450 \tag{1.11}$$
$$K_{c_2} = 10 \tag{1.12}$$
$$T^*_{lim} = 1 \tag{1.13}$$

A Noter que les résultats obtenus par les simulation effectuées dans cette thèse sont bien dans la zone de rebond du diagramme 1.4.

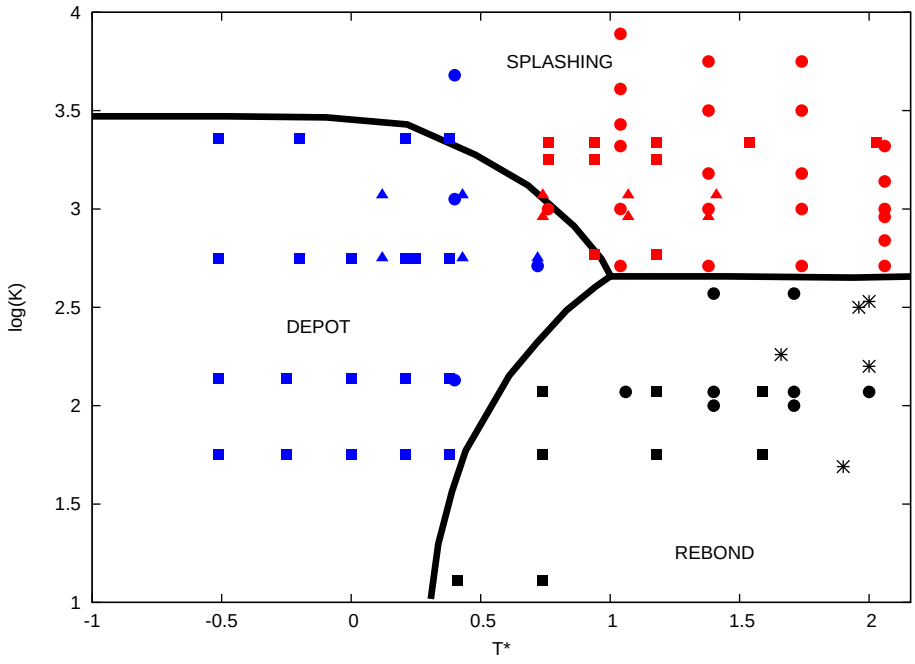



FIGURE 1.4 – Diagramme délimitant les 3 régimes d'intération entre des gouttes et des parois chaudes : le dépôt, le rebond et le splashing. Les résultats de l'université de WÜK (•), de Samenfink (▲), de Dewitte(■) et de la présente étude (∗) sont représentés.

Une fois les régimes d'interaction identifiés, l'influence de chacun des paramètres qui contrôlent les effets thermodynamiques et hydrodynamiques est étudiée et fait l'objet de la partie suivante.

## 1.3 Paramètres controlant l'écoulement

De très nombreux paramètres influencent les effets résultant de la chute de gouttes sur des parois chaudes ou froides. Dans le cas d'une goutte ou d'un train de gouttes, ces paramètres sont principalement les suivants :

- Diamètre des gouttes
- Vitesse de gouttes
- Angle d'incidence
- Tension de surface
- Viscosité des fluides
- Rugosité de la paroi
- Mouillabilité de la paroi
- Propriétés thermiques de la paroi
- Impact sur paroi sèche ou sur film (mince ou épais)

De nombreuses études expérimentales ont été effectuées pour étudier l'influence de certains de ces paramètres sur tous types de parois. Pourtant, des lacunes sur l'influence des autres paramètres ont été subtilement soulignées par *Cossali et al.* dans [16] : l'influence de la température de paroi est souvent négligée ou n'est pas étudiée, la rugosité n'est pas souvent prise en compte et l'épaisseur de film n'est pas mesurée.

Le manque de ces données entraine des approximations dans les codes de calcul qui utilisent les résultats expérimentaux pour modéliser les régimes d'interaction entre les gouttes et les parois. C'est en partant de ce constat que *Dewitte* [19] se propose d'étudier les paramètres d'influence peu étudiés cités plus haut dans le but d'effectuer la classification des régimes d'interaction présentés dans la Fig. 1.4.

Dans les figures 1.13 , 1.14 et 1.15 sont représentées les gammes de température de paroi, de Weber et de diamètre initial dans lesquelles l'interaction goutte/paroi chaude a été étudié par chaque auteur. C'est en effet ces paramètres qui ont été les plus étudiés et qui font l'objet des paragraphes suivants.

### 1.3.1 Effet du diamètre initial de la vitesse d'impact

#### Diamètre initial de la goutte

L'effet du diamètre initial de la goutte a été décrit dans le cas des gouttes sessiles dans la partie 1.1.1. Dans le cas des gouttes posées, le diamètre influence la forme de la goutte : les petites gouttes sont quasi-sphériques et les grosses gouttes se tassent et deviennent cylindriques. Elles peuvent même former des flaques dans le cas des très grands diamètres.

*Fujimoto et al.* [26] ont constaté que la plupart des études sur l'interaction goutte/paroi ont été effectuées sur les gouttes de diamètre supérieur à 1 mm (*Cf* Fig. 1.15). Les résultats ont ensuite été extrapolés pour les petites gouttes.

L'objet de leur étude est donc de comparer deux diamètres de gouttes pour des températures différentes et une certaine gamme de vitesses (voir Fig. 1.13, 1.14 et 1.15). Ils en déduisent que si $T < T_{Leid}$ les diamètres d'étalement adimensionnés ($D_{max}/D_0$) dépendent du nombre de Weber bien sûr, mais également du nombre de Reynolds car il y a contact entre la goutte et la paroi. Ils expliquent que les contraintes de cisaillement sont plus importantes pour les petites gouttes donc plus le nombre de Reynolds est élevé,

plus le rayon d'étalement est grand à Weber égal.

Lorsque la température $T > T_{Leid}$, le diamètre d'étalement maximal dépend du nombre de Weber mais ne semble pas dépendre du nombre de Reynolds dans la gamme de diamètres étudiés.

*Bernardin et Mudawar* [4] étudient les transferts de chaleur entre un train de gouttes et une paroi surchauffée en fonction des paramètres qu'ils ont identifié comme ayant une influence sur le phénomène Leidenfrost, à savoir : $D_0, V_0$ et $T_w$.

Ils montrent que les transfert thermiques sont plus efficaces pour des diamètres plus petits et des vitesses faibles. Leur objectif était d'étudier des trains de goutte monodisperses qui impactent une paroi chaude et d'appliquer les corrélations effectuées aux cas de plusieurs trains de gouttes qui interagissent ainsi qu'aux cas des sprays. Dans le cas de $n$ trains de gouttes, il est possible d'extrapoler les corrélations effectuées pour un seul train de goutte lorsqu'il y a peu d'interaction entre les gouttelettes mais les résultats s'avèrent inexacts dans le cas de multiples interactions.

#### Influence de la vitesse d'impact

La plupart des études dynamiques s'intéresse à l'influence de la vitesse (ou du nombre de Weber associé à la vitesse normale) sur le comportement de la goutte (voir Fig 1.14). *Anders et al.* [1] ont été parmi les premiers à étudier la perte de la quantité de mouvement $L$ pour le rebond sans gouttes satellites. La perte de quantité de mouvement $L$ est définit comme suit :

$$L = \frac{m\ V_1^n - m\ V_2^n}{mV_1^n} \tag{1.14}$$

Où $m$ est la masse de la goutte et $V_{1,2}^n$ les vitesses normales avant et après impact respectivement. Les auteurs ont observé que la vitesse tangente à la paroi demeure constante quelque soit l'angle d'incidence alors que la vitesse normale diminue quand l'angle change.

*Karl et Frohn* [56] ont également étudié cette perte de quantité de mouvement et ont trouvé une corrélation pour des petits nombres de Weber $We \leqslant 25$ :

$$L = 0,263We^{0,257} \tag{1.15}$$

Ils ont observé que les déformations de la goutte dépendent également du nombre de Weber et notamment le rayon d'étalement maximal qui augmente quand le We augmente.

*Chiu et Lin* [13] ont étudié la perte de la quantité de mouvement $L$ en fonction du nombre de Weber normal : cette perte augmente quand le nombre de Weber augmente.

### 1.3.2 Effet d'autres paramètres moins influents *a priori*

#### Influence de la gravité

Peu d'études ont été réalisées pour mesurer l'influence de la force de gravité sur l'interaction des gouttes sur des parois chaudes ; elle a toujours été négligée ou ignorée. C'est pour cette raison que *Qiao et Chandra* [82] ont étudié l'impact de gouttes d'eau et de $n$-heptane en microgravité.

D'après leurs résultats l'ébullition nucléee n'est pas affectée par la réduction de la force de gravité

et les bulles de vapeur se décrochent de l'interface entre le solide et le liquide même sans l'effet de la flottabilité.

La température de Leidenfrost ne peut être vraiment étudiée puisque les gouttes sont poussées loin de la surface. Pour le $n$-heptane, ils considèrent que $T_{Leid} \sim T_{dry}$ mais dans le cas de l'eau, les gouttes restent collées à la paroi même lorsque la température de la paroi dépasse la température de Leidenfrost.

La plupart des etudes expérimentales présentées dans ce chapitre utilisent des trains de gouttes afin de mieux controler les paramètres étudiés. Ces trains de gouttes impactent la surface avec un angle d'incidence puisqu'un impact normal ferait interagir les gouttes incidentes et les gouttes ayant déjà rebondi sur la paroi, et c'est un phénomène à éviter pour ne pas fausser les mesures. *Qiao et Chandra* constatent que la direction à partir de laquelle provient le spray influence le transfert de chaleur. L'étude de cette influence fait l'objet du paragraphe suivant.

### Influence de l'angle d'incidence $\alpha$

L'angle d'incidence est calculé entre la direction de l'impact du train de gouttes et la paroi. *Castanet et al.* [11] ont étudié les régimes d'étalement (rebond, splashing et dépot) en fonction de la température de la paroi, de l'angle d'incidence, de la taille de la goutte et de la vitesse. Les graphes suivants montrent les changements de température en fonction de l'angle d'incidence (Fig. 1.5) et en fonction de la température de la paroi pour deux angles d'incidence $\alpha = 17^o$ et $\alpha = 33^o$ (Fig. 1.6).

Comme la vitesse d'injection est maintenue à $V = 9.1\ m.s^{-1}$, le fait de changer l'angle d'incidence change la vitesse normale de l'impact et c'est également dans ce sens que le paramètre $\alpha$ a une influence sur l'échauffement de la goutte.

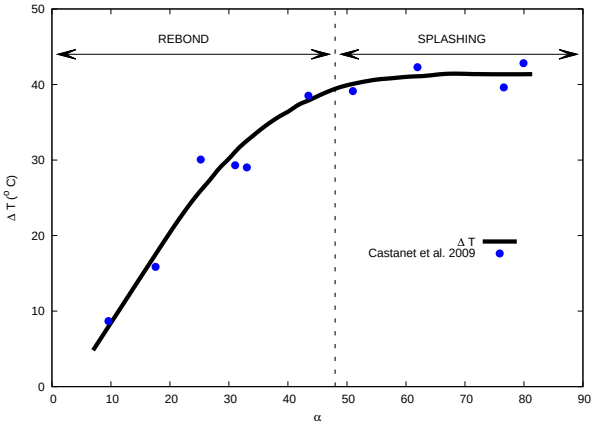



FIGURE 1.5 – Changement de température en fonction de l'angle d'incidence pour une goutte d'eau. $D_0 = 106\ \mu m, V = 9.1\ m.s^{-1}, T_w = 400^oC$

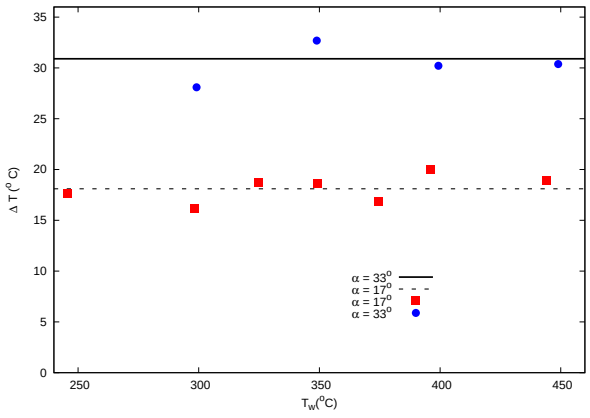



FIGURE 1.6 – Changement de température en fonction de la température de la paroi pour deux angles d'incidence $\alpha$. $D_0 = 106\ \mu m, V = 9.1\ m.s^{-1}$

*Karl et Frohn* [56] ont également fait une étude expérimentale sur les régimes d'impact des gouttes qu'ils ont catalogué de la façon suivante : réflexion (rebond sans gouttes satellites), rebond avec 1 à

3 satellites et splashing. Ils s'intéressent particulièrement au régime de reflexion des gouttes et à la transition entre la reflexion et le rebond avec des gouttes satellites. Ils ont montré que lorsque l'angle d'incidence est plus petit qu'une certaine valeur limite $\alpha_{lim}$, la goutte incidente ne se désintègre pas.

De plus, à partir des travaux de *Yao et Cai*, *Karl et Frohn* constatent que lorsque l'angle d'impact diminue et que $\alpha < \alpha_{lim}$, la température de Leidenfrost diminue également. Ils expliquent le phénomène par le fait que lors de l'impact, le gaz entrainé contribue, avec la vapeur, à porter la goutte de telle sorte qu'elle rebondit pour des températures de paroi plus faibles.

**Influence des propriétés du liquide**

L'influence des propriétés du liquide sur l'impact des gouttes a été étudié par *Chiu et Lin* [13] qui utilisent un fluide composé d'eau et de diesel et font varier la fraction massique $\gamma$ de 0 pour un composé d'eau pure à $0,306$ :

$$\gamma = \frac{\mathcal{V}_w \rho_w}{\mathcal{V}_d \rho_d} \tag{1.16}$$

Où $\mathcal{V}_w$ et $\mathcal{V}_d$ sont les volumes d'eau et de diesel et $\rho_w$ et $\rho_d$ les masse volumiques de l'eau et du diesel.

Les sous-régimes d'interaction d'une goutte avec un paroi chauffée (rebond, rebond avec un satellite et rebond avec plusieurs satellites) sont étudiés en fonction de la fraction massique $\gamma$ :

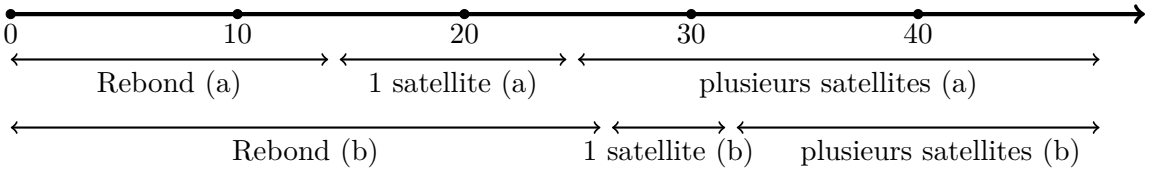



FIGURE 1.7 – Classification des sous-régimes d'intéraction goutte/paroi chaude pour des fractions massiques de $\gamma = 0$ (a) et $\gamma = 0.3$ (b) d'après *Chiu et Lin*

L'augmentation du paramètre $\gamma$ entraine une perte de symétrie de la goutte lors du rebond. De plus, les gouttes secondaires apparaissent pour des nombres de We plus importants lorsque $\gamma$ augmente (voir Fig 1.7), ce qui implique que l'ajout du diesel contribue à augmenter la cohésion de la goutte.

Les auteurs ont également remarqué un phénomène lors du rebond d'une goutte de composés d'eau et de diesel : à partir d'un nombre de Weber limite $We^{lim}$, les gouttes satellites sont composées d'eau pure et si $\gamma$ augmente, la limite $We^{lim}$ diminue.

*Bertola* [5] a également étudié le cas des gouttes composées d'un mélange d'eau et d'un polymère. Son objectif est d'étudier l'effet Leidenfrost pour des fluides non-Newtoniens et de qualifier l'effet de la viscoélasticité du fluide. *Bertola* montre que pour des concentration plus grandes de polymères (400 ppm) la hauteur du rebond est plus grande. La concentration de polymères n'a presque pas d'influence sur le diamètre d'étalement ni sur les oscillations de la goutte après le rebond. Elle ne semble donc pas avoir un impact majeur sur le rebond de la goutte si ce n'est de diminuer l'énergie de dissipation après le rebond d'où l'augmentation de la hauteur du rebond lorsque $\gamma$ augmente.

### Influence de la rugosité

Comme l'ont souligné *Cossali et al.*, l'influence de la rugosité de la plaque chaude a très peu été étudiée. *Karl et Frohn* ont observé la transition entre le régime de rebond simple et le rebond avec une goutte satellite en fonction de l'angle d'incidence pour plusieurs surfaces avec des hauteurs moyennes $R_z$ de rugosité différentes.

La Fig. 1.8 montre que plus la rugosité est importante, plus l'énergie cinétique necessaire pour former la goutte secondaire est importante. Comme cela a été dit dans la partie concernant l'influence de l'angle d'incidence, en dessous de $\alpha = 4^o$ les gouttes secondaires ne se forment plus. Au dessus de $\alpha = 8^o$, la transition est indépendante de l'angle d'impact quelque soit la rugosité dans la gamme étudiée.

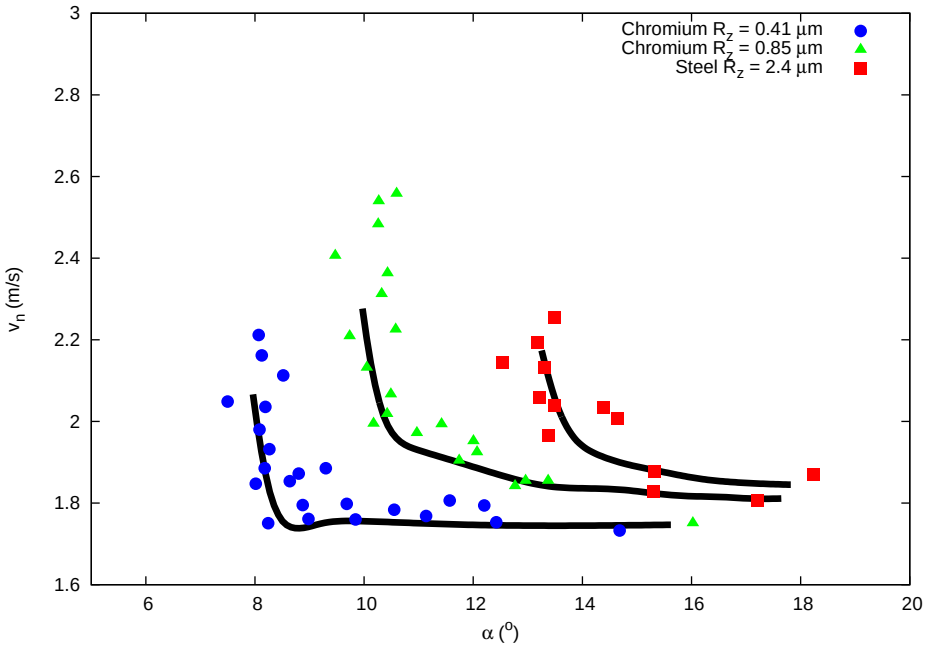



FIGURE 1.8 – Transition entre les régimes de rebond et de rebond avec une goutte satellite pour des gouttes d'ethanol ($D_0 = 195\mu m$, $T_{goutte} = 296K$, $T_w = 598K$) et trois rugosités différentes

Les autres paramètres ayant une influence sur le comportement ont très peu été étudiés soit parce qu'on en a négligé l'influence, soit pour des difficultés techniques. La simulation numérique est une alternative pour l'étude de paramètres isolés à moindre coût et de manière peut être plus exhaustive. La partie suivante traite des études numériques effectuées sur l'impact de gouttes sur des parois chaudes. Elles ne semblent pas être très nombreuses en raison de la difficulté du problème mais elles fournissent un bon complément aux études expérimentales sur le sujet.

## 1.4 Simulation numérique du rebond de goutte

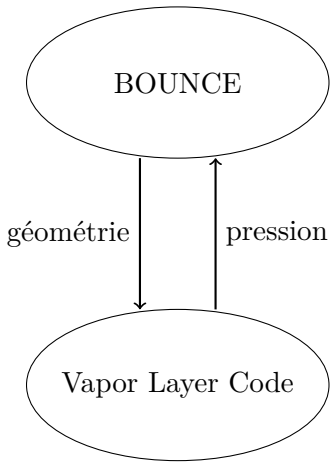
Les pionniers dans le domaine de la simulation numérique de l'effet Leidenfrost sont *Harvie et Fletcher* [44, 45] qui ont effectué des simulations 2D-axisymétriques de l'impact d'une goutte sur une paroi chaude. Comme les échelles de la goutte et du film de vapeur sont très différentes, deux modèles couplés ont été utilisés pour simuler le phénomène : un modèle hydrodynamique (BOUNCE) qui résout la géométrie de la goutte et un modèle thermodynamique qui résout ce qui se passe dans la couche de vapeur.

Le modèle hydrodynamique BOUNCE résout les équations de Navier-Stokes pour un écoulement diphasique incompressible avec une méthode de type VOF pour déterminer la position de l'interface (*Cf* Chap. 2 partie 2). Les équations sont résolues dans une configuration 2D-axisymétrique sur un maillage orthogonal utilisant la méthode CSF de *Brackbill et al.* [10] pour prendre en compte la tension de surface.

La force de pression qui agit sous la goutte dans la couche de vapeur est calculée par le code thermodynamique « vapor layer code »(VLC) avec une méthode développée par *Harvie* [43].

Le code VLC résout d'abord les équations de Navier-Stokes simplifiées dans la couche de vapeur pour calculer la fraction volumique de vapeur, la température, la vitesse des fluides dans la couche de vapeur et la pression (qui sera utilisée dans le code BOUNCE). Pour cela, la position de la goutte doit être connue (elle est calculée par BOUNCE) ainsi que la vitesse de vaporisation $\dot{\omega}$.

La vitesse $\dot{\omega}$ est également calculée par VLC en réalisant une analyse du transfert thermique entre le solide, le liquide, la vapeur et le gaz. Ce modèle s'appuie sur la théorie cinétique des gaz (loi de Schrage) qui permet de déduire le flux massique local de vaporisation à partir des propriétés thermodynamiques locales (température et pression).




Les résultats obtenus à partir de ce modèle couplé ont été comparés aux expériences réalisées par *Wachters et Westerling* [102], *Groendes et Mesler* [37] et *Qiao et Chandra* [82].

Pour des configurations avec des nombres de Weber $We < 30$, le modèle reproduit fidèlement ce qui se passe dans les expériences. La figure 1.9 est tirée de [45] et montre en effet que la simulation de l'impact est bien reproduite. Les simulations montrent toutefois la création d'une bulle à l'intérieur de la goutte, ce qui ne se produit pas dans les expériences.

Pour des configurations où le nombre de Weber $We > 30$, le modèle n'est pas en mesure de produire des résultats satisfaisants. En effet, le comportement de la goutte est de nature tri-dimensionnelle et l'approximation symétrique entraine de faux résultats. Dans la Fig. 1.10, des couronnes de liquide se forment après l'impact, ce qui ne se produit pas dans la phase de rebond.

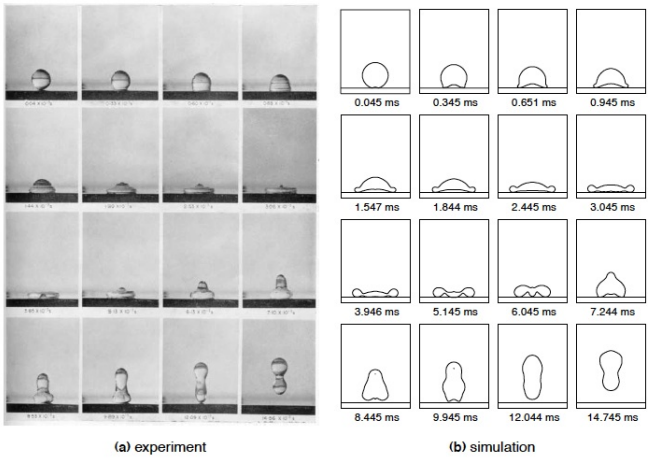



FIGURE 1.9 – Impact à $We = 15$ réalisé par *Wachters and Westerling* (a) et simulation numérique correspondante par *Harvie et Fletcher* (b) pour une goutte d'eau de diamètre initial $D_0 = 2.3mm$

Les auteurs ont également comparé leurs résultats aux simulations de *Qiao et Chandra* et ont obtenu des résultats satisfaisants pour le rebond d'une goutte de $n$-heptane avec un nombre de Weber $We = 32$. Toutefois, les résultats avec l'eau n'ont pu être reproduits du fait des approximations du modèle dans la couche de vapeur.

Si les résultats sont acceptables pour des petits nombres de Weber, il faut tout de même noter que le modèle microscopique a été conçu pour décrire les changements de phase d'après la loi de Schrage qui n'est valide que dans des conditions de non-equilibre thermodynamique ce qui implique que le flux massique local de vaporisation ne sera différent de zéro que si il y a un saut de température à l'interface liquide/vapeur.

De plus, comme la loi de Schrage est utilisée, le flux massique de vaporisation ne dépend plus du saut de gradient de température à l'interface mais de la discontinuité de température et d'un coefficient d'accommodation. Les valeurs des coefficients d'accommodation déterminés par différents auteurs pour un même liquide peuvent beaucoup différer d'une étude à l'autre.

Cependant, si l'équilibre thermodynamique local est respecté, la condition de saut sur l'entropie implique la continuité des températures à l'interface (*Ishii and Hibiki* [50]) sauf si la pression est discontinue à l'interface [54]. Dans ce cas, les corrections dues au saut de pression à l'interface n'entrainent généralement que de très faibles variations de température.

En conclusion, il semblerait que l'utilisation de la loi de Schrage dans des simulations numériques, si l'on suppose que l'équilibre thermodynamique local est respecté, entrainerait un désaccord avec la première loi de la thermodynamique (le flux massique de vaporisation ne dépend pas du saut de gradient thermique) et/ou de la deuxième loi de la thermodynamique (la température n'est pas continue à l'interface en contradiction avec la condition de saut sur l'entropie).

Il semble donc que l'utilisation de cette loi conduise à un problème surdéterminé puisque le flux massique local de vaporisation peut être directement calculé à partir du saut de gradient de température à l'interface sans utiliser de coefficient d'accommodation. Pourtant, la loi de Schrage est souvent utilisée puisqu'elle permet de calculer $\dot{\omega}$ bien plus facilement que l'approche continue. En effet, cette dernière

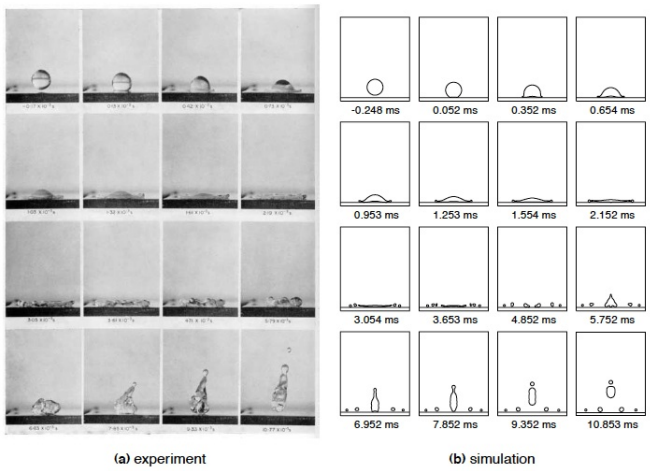



FIGURE 1.10 – Impact à $We = 74$ réalisé par *Wachters and Westerling* (a) et simulation numérique correspondante par *Harvie et Fletcher* (b) pour une goutte d'eau de diamètre initial $D_0 = 2.3mm$

approche suppose de calculer le gradient thermique de façon précise, une tâche bien plus ardue.

En 2005, *Ge et Fan* ont réalisé des simulations numériques tridimensionnelles de l'impact des gouttes avec des parois. Une fois encore, deux modèles sont couplés pour arriver à cette fin : un code hydrodynamique et un code qui résout le comportement de la couche de vapeur.

Le code hydrodynamique résout les équations de Navier-Stokes pour un écoulement diphasique avec une méthode Level-Set pour le suivi de l'interface (*Cf* Chap. 2 partie 2).

Le code thermodynamique résout les équations de Navier-Stokes incompressibles simplifiées en négligeant les dérivées temporelles et en supposant la couche de vapeur saturée. Une analyse dimensionnelle montre que les termes liés à l'inertie du fluide, qui ont été négligés dans le modèle de *Harvie et Fletcher*, doivent être pris en compte pour des écoulements à plus grands Reynolds et une correction du modèle est faite dans ce sens.

Ce découplage implique que les effets thermiques et de changement de phase ne sont évalués que dans le film de vapeur. De plus, le modèle de lubrification utilisé ne permet pas de décrire de manière complète la dynamique de l'écoulement dans le film de vapeur puisqu'elle est couplée au mouvement de l'interface.

Les simulations numériques ont également été comparées aux mêmes expériences que *Harvie et Fletcher* : *Wachters et Westerling* [102], *Groendes et Mesler* [37] et *Qiao et Chandra* [82].

Les résultats numériques sont en accord avec les expériences aussi bien dans le cas de l'écoulement à We=15 de l'expérience de *Wachters et Westerling* que dans celui de $We = 74$. Le comportement global de l'impact d'une goutte à $We = 180$ est également calculé et donne des résultats satisfaisants.

Outre le comportement de la goutte, le changement de température dans le solide du fait du transfert de chaleur entre la goutte, la vapeur et la paroi est également calculé. La figure 1.11, montre que les isocontours dépendent de la position et de la forme de la goutte.

La température du solide pour plusieurs positions par rapport au centre de l'impact a été calculée (*Ge et Fan*) et mesurée (*Groendes et Mesler*) (*Cf* Fig. 1.12). La variation de température calculée oscille beaucoup moins que celle mesurée. Les simulations montrent que c'est au centre de l'impact que les

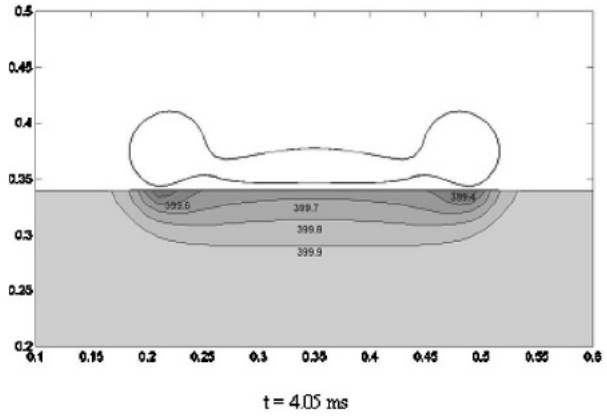



FIGURE 1.11 – Isocontours de température (en $^oC$) dans le solide impacté par une goutte de $2.3mm$ de à $We = 15$ réalisés par *Ge et Fan*. La température initiale du solide est de $400^oC$.

transferts thermiques sont les plus efficaces puisque c'est là que la température baisse le plus.

Une autre étude numérique, a été réalisée par *Nikolopoulos et al.* [73] et des simulations d'impacts de gouttes d'eau et de $n$-heptane ont été effectuées en 2D et 3D. Cette fois-ci, le maillage est affiné autour de la goutte pour capturer l'écoulement dans le film de vapeur sous la goutte sans utiliser de modèle couplé.

Les méthodes numériques utilisées sont peu documentées. Il semble cependant que les auteurs utilisent une expression théorique du taux de changement de phase qui dépend du volume de la maille $\mathcal{V}_{cell}$ et donc de la précision du calcul ce qui paraît difficilement justifiable.

La prochaine partie de ce manuscrit traitera des méthodes numériques dédiées à la simulation des écoulements diphasiques. Des cas-tests de validation du traitement des termes visqueux sont présentés à la fin du chapitre.

Le chapitre 3 est dédié aux algorithmes de résolution pour les changements de phase. Nous distinguons notamment les méthodes adaptées à l'ébullition des méthodes adaptées à l'évaporation. Nous proposons dans ce chapitre une méthode originale permettant de modéliser simultanément et continûment les deux phénomènes. Des cas-tests permettant d'évaluer l'efficacité de cette nouvelle méthode sont présentés à la fin de ce chapitre.

Enfin, les dernier chapitre est consacré à l'utilisation de ce nouvel algorithme de calcul pour la simulation numérique directe de l'effet Leidenfrost. Pour ce faire, des maillages très raffinés près de la paroi solide ont été utilisés. Les résultats des simulations sont exploités et comparés à des résultats expérimentaux.

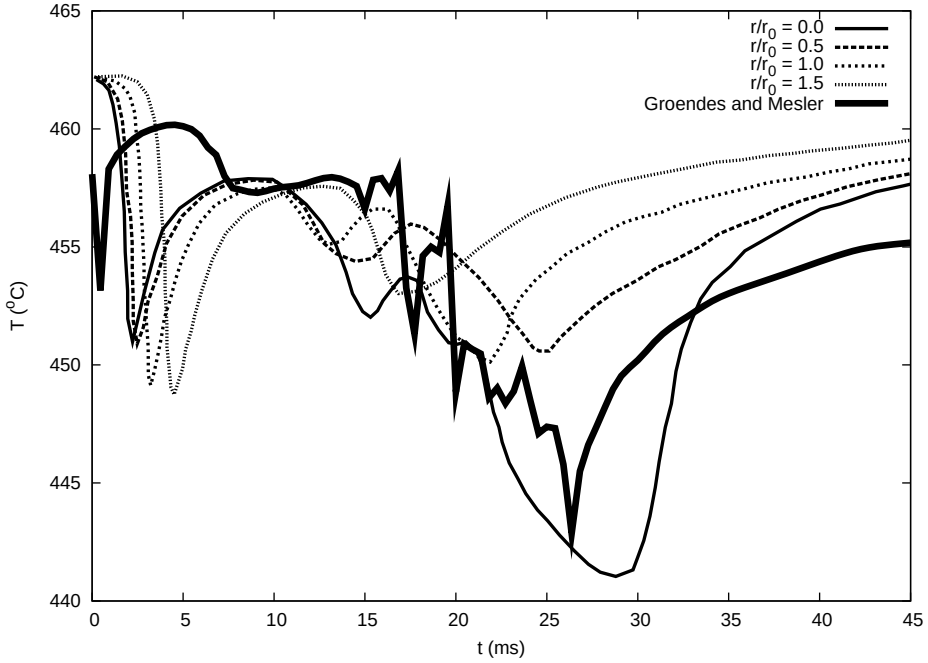



FIGURE 1.12 – Températures dans la partie supérieure du solide pour différentes positions par rapport au centre de l'impact. $(r_0, We, T_w) = (2.35mm, 68, 462^oC)$ par *Ge et Fan*

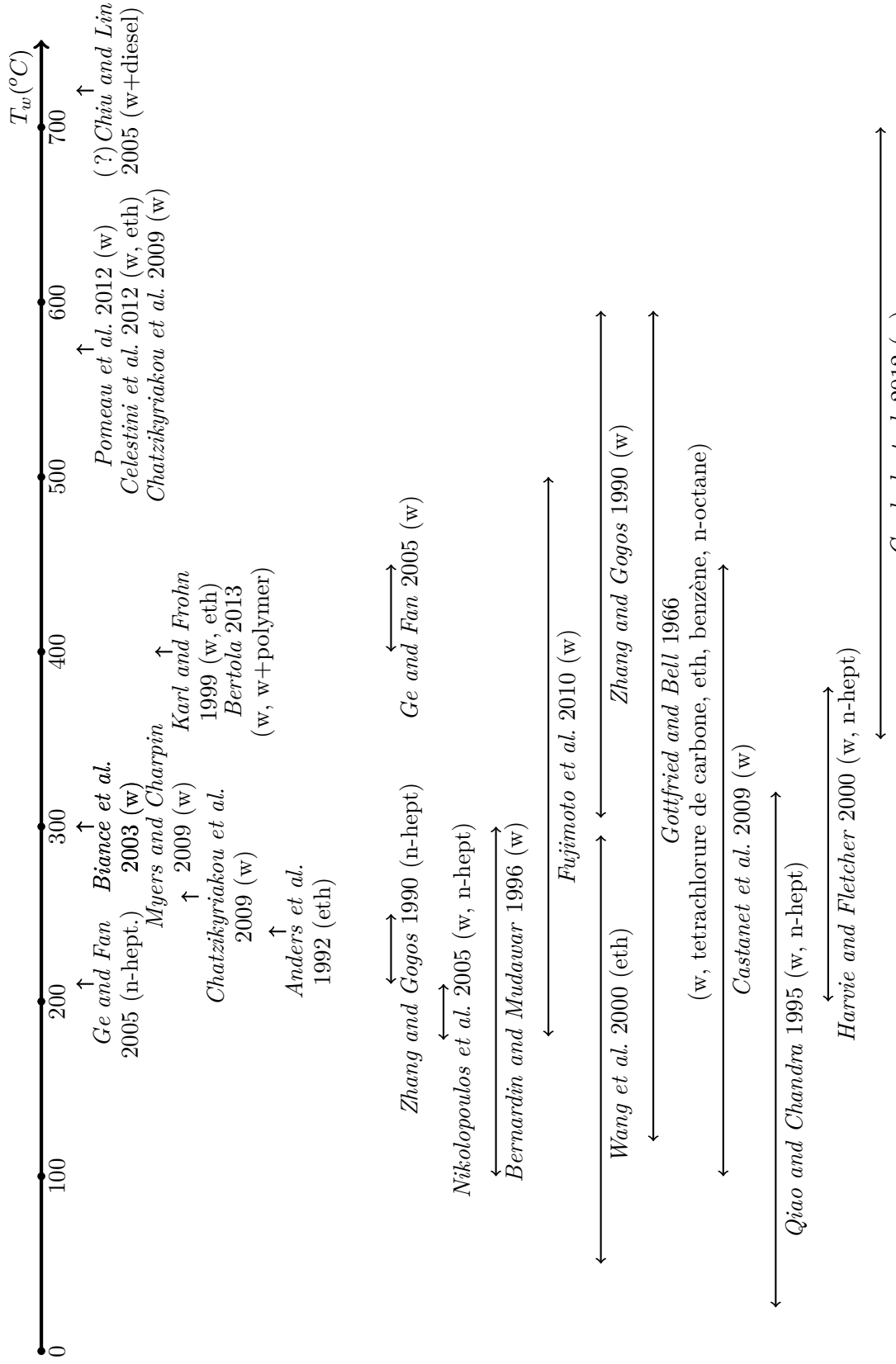



FIGURE 1.13 – Classification des études en fonction de la gamme de température de surface $T_w$ en $^oC$ considérée

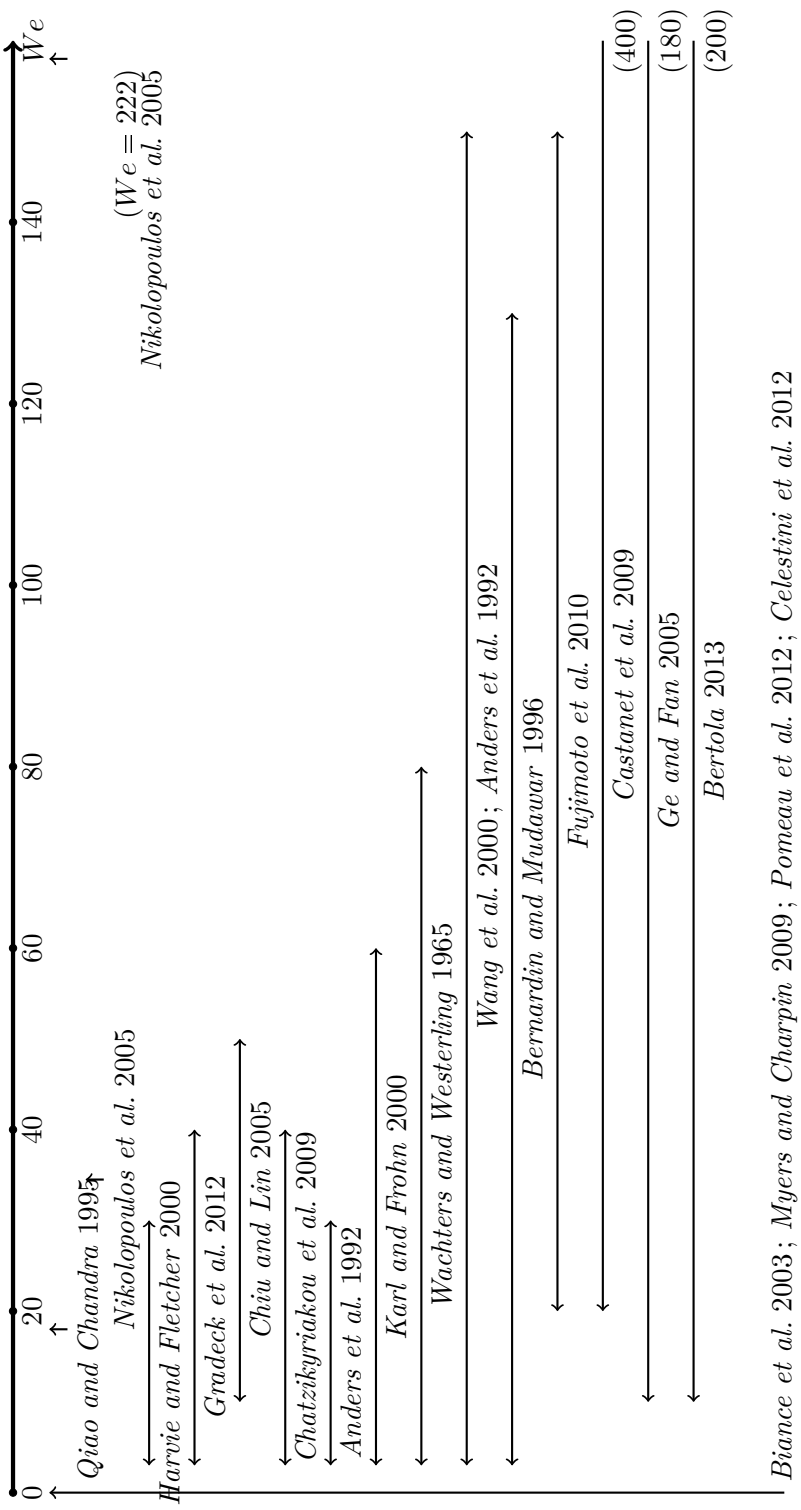



FIGURE 1.14 – Classification des études en fonction de la gamme de $We$ considérée

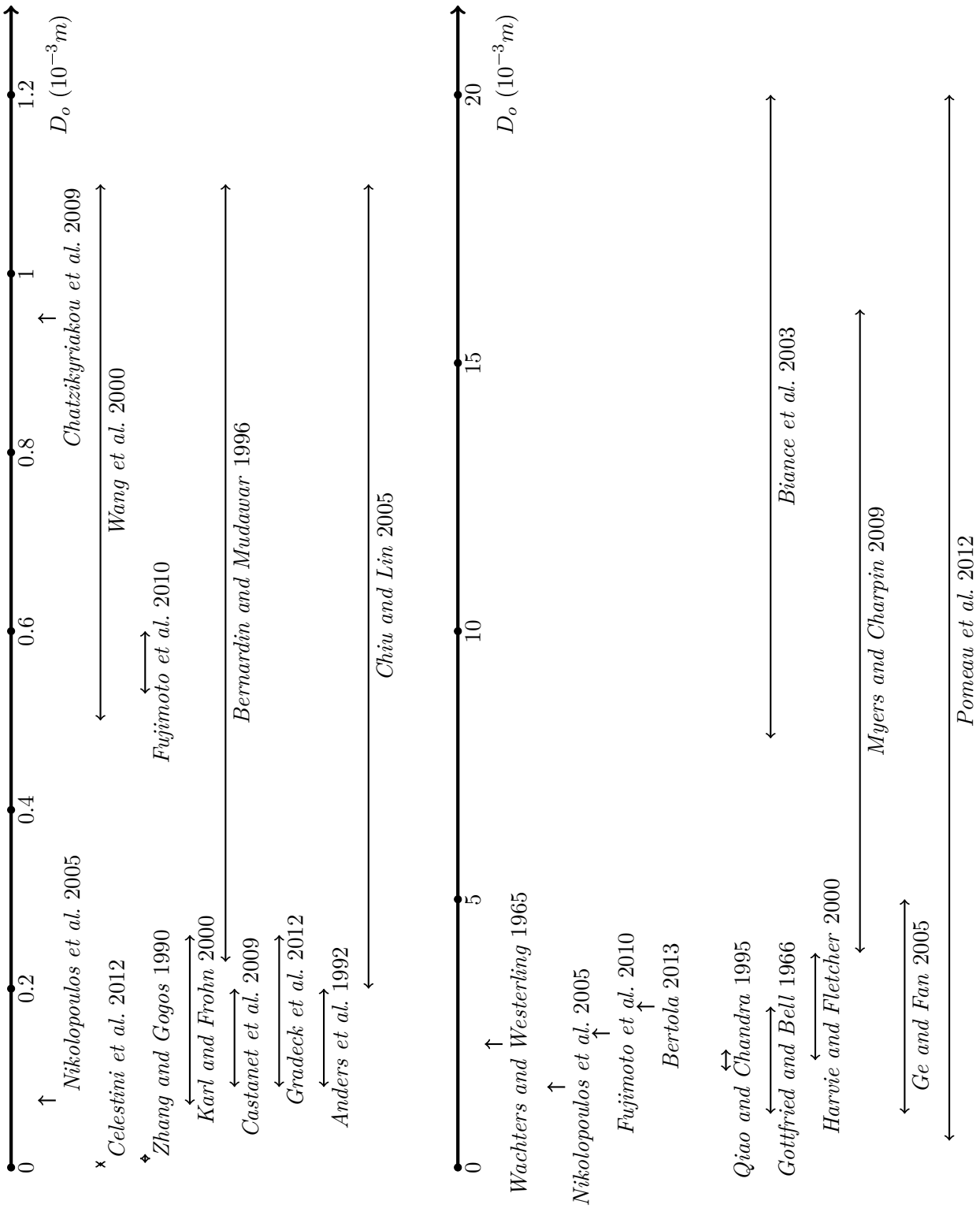



FIGURE 1.15 – Classification des études en fonction de la gamme de diamètre initial de goutte $D_0$ considérée

Chapitre 2

# Méthodes numériques pour la simulation des écoulements diphasiques

## Sommaire


**2.1 Méthodes de localisation d'une interface entre fluides . . . . . 28**
2.1.1 Généralités sur les méthodes permettant de localiser l'interface . . . . . 29
2.1.2 La méthode Level Set . . . . . 32
**2.2 Méthode de Projection pour la résolution des équations de Navier-Stokes . . . 38**
2.2.1 Méthode de Projection pour un écoulement monophasique . . . . . 39
2.2.2 Discrétisations spatiales pour la méthode de projection . . . . . 40
2.2.3 Critère de restriction du pas de temps . . . . . 44
**2.3 Méthode de projection pour les écoulements diphasiques et traitement du terme visqueux . . . . . 45**
2.3.1 Prise en compte d'un terme source singulier comme une condition de saut à l'interface 46
2.3.2 Méthode Continuous Surface Force (CSF) . . . . . 48
2.3.3 Méthode « Ghost Fluid Primitive Viscous Method » . . . . . 49
2.3.4 Méthode « Ghost Fluid Conservative Viscous Method » . . . . . 51
2.3.5 Méthode « Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous Method » . . . . . 52
**2.4 Discrétisation spatiale des méthodes numériques pour le terme visqueux . . . . 52**
2.4.1 Discrétisation spatiale de la méthode CSF . . . . . 53
2.4.2 Discrétisation spatiale de la méthode GFCVM . . . . . 56
2.4.3 Discrétisation spatiale de la méthode GFPVM . . . . . 57
2.4.4 Discrétisation spatiale de la méthode GFSCVM . . . . . 59
**2.5 La méthode Ghost Fluid pour le traitement des conditions de saut . . . . . 60**
2.5.1 Méthode Ghost Fluid 1D . . . . . 60
2.5.2 Généralisation multidimensionnelle de la méthode Ghost Fluid . . . . . 65
**2.6 Validation de l'algorithme de résolution des écoulements diphasiques . . . . . 70**
2.6.1 Bulles sphérique en ascension sous l'effet de la gravité . . . . . 71
2.6.2 Bulle en ascension dans un fluide visqueux à $Re_\infty = 20$ . . . . . 74


Les algorithmes permettant de résoudre l'équation de Navier-Stokes pour un écoulement diphasique incompressible sont le principal objet de ce chapitre. La première partie est consacrée aux méthodes de localisation de l'interface entre deux fluides. Elles sont classées en deux catégories : les méthodes Lagrangiennes, qui localisent explicitement l'interface grâce à des marqueurs transportés à la vitesse locale et les méthodes Eulériennes qui utilisent un champ scalaire transporté par un champ de vitesse

pour la capturer. La méthode Level-Set, qui fait partie de cette dernière catégorie, est étudiée plus en détail car c'est celle qui est utilisée dans le code $\mathcal{DIVA}$ pour effectuer la présente étude.

L'équation de Navier-Stokes pour un écoulement monophasique est résolue avec la méthode de Projection présentée dans la deuxième partie de ce chapitre. Lorsque les schémas de discrétisation sont explicites, le pas de temps est contraint par le pas d'espace. Les critères de restriction dus au traitement explicite des termes de convection, viscosité, gravité et capillarité sont donc présentés ensuite.

Dans un écoulement diphasique, le terme de viscosité ne peut être traité aussi simplement que pour un écoulement monophasique : les différentes façons de prendre en compte ce terme sont donc détaillées dans la partie suivante. De plus, un terme lié à la tension de surface vient s'ajouter à l'équation de Navier-Stokes et la manière de le traiter est également présentée.

La méthode Ghost-Fluid qui permet de résoudre une équation de Poisson avec des conditions de saut à l'interface fait l'objet de la partie suivante. Elle sera utilisée pour la discrétisation spatiale des équations et est exposée pour les configurations 1D et 2D dans la partie qui suit.

Finalement, les résultats des différents cas tests permettant de valider l'ensemble des méthodes numériques sont présentés. Les cas d'une bulle sphérique en ascension et d'une bulle déformée en ascension dans un fluide visqueux sont présentés afin de tester les différentes méthodes pour traiter le terme lié à la viscosité.

## 2.1 Méthodes de localisation d'une interface entre fluides

Une interface est une surface délimitant deux sous-domaines sur laquelle peuvent avoir lieu des échanges (de matière, de quantité de mouvement, d'énergie...). Dans les cas qui seront étudiés, l'interface délimite deux fluides : un liquide se vaporisant dans un gaz. C'est également un espace de dimension $n-1$ se déplaçant dans un domaine de dimension $n$ qu'il va être important de localiser de façon précise à chaque instant $t$.

Afin de caractériser la qualité d'une méthode de localisation d'interface *Kothe & Couderc* [57, 17] ont identifié les critères suivants :

- Il est important de localiser l'interface de façon très précise, notamment si elle présente une topologie complexe en dessous de l'échelle de la maille. Pour cela, des schémas d'ordre élevés en temps et en espace sont souvent nécessaires.
- La méthode doit pouvoir prendre en compte tous les types de mouvements et pouvoir gérer les comportements de l'interface tels que les coalescences, les étirements et les ruptures. Les propriétes et comportements physiques doivent être respectés de la manière la plus fidèle possible.
- Dans le cas des écoulements diphasiques, la méthode devrait respecter au mieux la conservation de la masse au cours du temps.
- Il est également utile de localiser l'interface en présence de plusieurs objets. Par exemple, pour l'étude d'un écoulement diphasique autour d'un cylindre, la méthode doit permettre de différencier et localiser les fluides et le/les solide(s).
- Il est essentiel que le calcul des propriétés géométriques de l'interface tels que la normale ou la courbure soit possible et précis.

Outre ces critères liés au comportement de l'interface, les principes permettant de caractériser une méthode numérique de façon générale sont à évaluer.

- La méthode devrait être « robuste » : elle ne devrait pas s'arrêter abruptement mais dégénérer

graduellement si les données ne sont pas suffisantes.
- Attendu que l'interface doit être localisée à chaque pas de temps, l'efficacité et la rapidité de la méthode est à prendre en compte.
- Les moyens informatiques étant de plus en plus performants et permettant de faire de plus grands calculs, notamment des calculs en 3 dimensions, une méthode de suivi d'interface en 2D devrait être adaptable en 3D.

C'est à l'aide de ces critères que les méthodes présentées ci-après sont évaluées puisque certaines de ces méthodes sont plus adaptées que d'autres à un problème considéré.

### 2.1.1 Généralités sur les méthodes permettant de localiser l'interface

Comme cela a été souligné dans l'introduction de ce chapitre, les manières de localiser l'interface peuvent être classées en deux catégories : les méthodes dites « Lagrangiennes » et les méthodes « Eulériennes ».

Dans les premières, l'interface est précisément localisée à l'aide de marqueurs (avec éventuellement un maillage réadapté) et dans les deuxièmes, la localisation de l'interface est effectuée grâce aux données d'une fonction sur les points du maillage. Une brève description des principales méthodes existantes est donnée par la suite.

#### Méthodes Lagrangiennes

Une des méthodes pionnières de suivi d'interface est la méthode Marker and cell (MAC), imaginée par *Harlow & Welsch* [40] en 1965. Cette méthode a été créée pour étudier la dynamique d'un fluide incompressible avec une surface libre (voir fig. 2.1 a). Les équations de Navier-Stokes sont résolues avec une méthode de projection permettant d'assurer la condition d'incompressibilité à chaque pas de temps. La nouvelle position des marqueurs est calculée à l'aide du champ de vitesses (avec éventuellement une redistribution si les marqueurs sont trop proches). La difficulté à reconstruire précisément l'interface et le manque de précision rendent la méthode MAC obsolète aujourd'hui. Elle sert cependant d'inspiration pour des méthodes de « Front Tracking » plus performantes et exploitables.

Dans le même philosophie que la méthode MAC on peut citer la méthode SPH [1] développée simultanément par *Gingold & Monaghan* [31] et *Lucy* [63] en 1977. Implémentée dans le but de modéliser l'évolution des étoiles non-sphériques dans le domaine de l'astrophysique, elle peut être utilisée pour les écoulements multiphasiques. En considérant une description purement Lagrangienne de l'écoulement, les auteurs étudient la dynamique des éléments de fluide en résolvant les équations qui régissent son mouvement. Ils introduisent une méthode leur permettant de déterminer les forces appliquées au système à partir de la position des éléments de fluide à un moment donné.

La méthode de « Front tracking » a été principalement développée par *Glimm et al.* [33] et plus tard par *Unverdi and Tryggvason* [100] pour repérer de façon précise l'interface entre deux fluides. Comme pour la méthode MAC, les fluides sont repérés par des marqueurs, mais ceux-ci ne sont présents que sur l'interface (*cf* Fig. 2.1 b). Cette méthode peut être implémentée en 2D et 3D, ne conserve pas la masse *à priori* et n'est pas adaptée pour effectuer des ruptures ou des jonctions d'interface. L'interface peut être repérée par une série de segments qui lie chacun des marqueurs en 2D ou par une série de triangles en 3D (en réalisant par exemple une triangulation de Delauney à partir de la position des marqueurs).

1. Pour Smoothed-particle hydrodynamics.

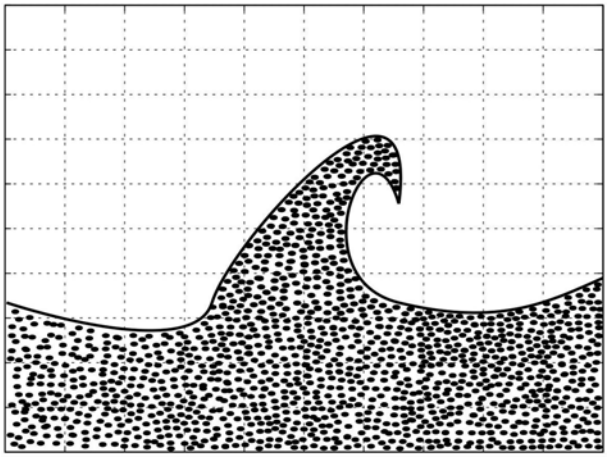
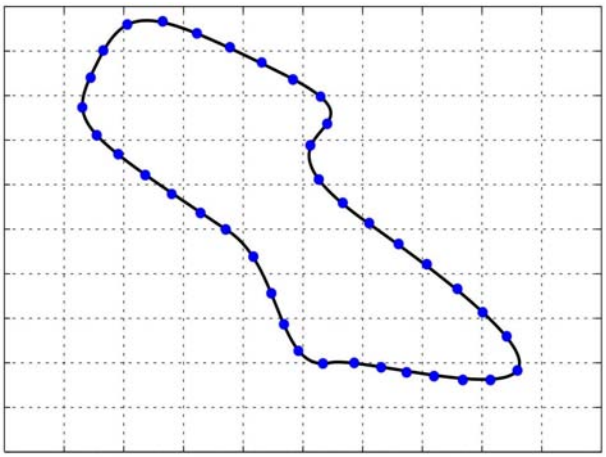
a.  b. 

FIGURE 2.1 – Illustration des méthodes MAC [40] (a) et de « Front tracking » (b)

Il est parfois nécessaire de redistribuer les marqueurs qui, suivant l'écoulement, peuvent se concentrer à certains endroits.

Les méthodes utilisant un maillage adapté à chaque pas de temps permettent de localiser l'interface avec le maillage lui même (*cf* Fig 2.2). L'un des grands avantages de cette méthode, c'est qu'elle permet de considérer ce qui se passe à l'interface comme une condition aux limites. Elle nécessite néanmoins de critères artificiels pour prendre en compte les changements de topologie, à savoir, les coalescences ou les ruptures d'interface. Elle ne conserve pas la masse et si l'interface change de forme, il est nécessaire de refaire un maillage, ce qui augmente le temps de calcul. Il faut donc un programme rapide permettant de faire des maillages adaptés. La méthode de discrétisation de type elements finis est généralement utilisée pour approximer les équations de l'écoulement dans ce type de maillage puisqu'elle s'adapte parfaitement à tous types de géométrie de mailles.

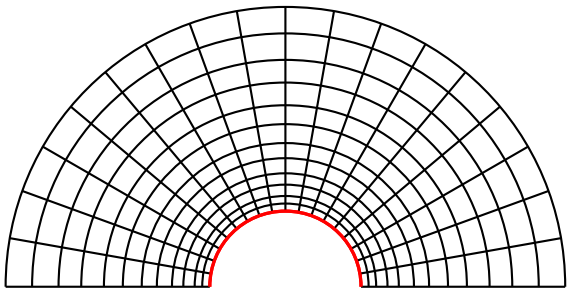


FIGURE 2.2 – Maillage épousant l'interface entre une goutte sphérique et l'air à chaque pas de temps

De nombreuses améliorations aux algorithmes originaux ont été effectués pour combler les limites inhérentes à chacune de ces méthodes, notamment des méthodes hybrides cumulant les avantages de chacunes des approches dont elles sont issues. Les méthodes de type Eulerien utilisent une toute autre philosophie pour repérér l'interface et font l'objet du paragraphe suivant.

### Méthodes Eulériennes

À la différence des méthodes Lagrangiennes, les méthodes Eulériennes ne suivent pas l'interface de manière explicite mais utilisent une fonction donnée à chaque point du maillage qui va déterminer le volume de fluide dans la maille (méthode VOF) ou la distance signée au fluide (Méthode Level Set).

La méthode VOF est initialement développée par *Noh & Woodward* [74] et *Hirt & Nichols* [47]. La méthode VOF s'inspire de la méthode MAC [40] en remplaçant les marqueurs utilisés pour quantifier le volume de fluide dans chaque maille par une fonction $C$ définie à chaque point du maillage. La fonction $C$ vaut 1 dans une maille entièrement recouverte par le fluide, 0 si il n'y a pas du tout de fluide et $0 < C < 1$ si l'interface traverse la maille (*Cf* Fig. 2.3). Elle est transporté par la vitesse du fluide et un algorithme de reconstruction est souvent nécéssaire pour reconstituer l'interface à partir de la fonction C.

De nombreuses améliorations de cette méthode (dont celle qui sera décrite dans ce paragraphe) ont été effectuées par la suite (*Youngs* [108], *Lafaurie et al.* [58], *Puckett et al.* [81], *Rider et Kothe* [83], *Gueyffier et al.* [38], *Scardovelli et Zaleski* [85], *Josserand et al.* [53] et *Popinet* [79]) notamment pour la reconstruction de l'interface en 2D et 3D, le transport de la fonction couleur ou le calcul de la courbure.

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0.2 | 0.05 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 0.95 | 0.7 | 0.2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 0.95 | 0.35 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 0.96 | 0.25 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0.7 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0.97 | 0.05 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0.2 | 0 |

FIGURE 2.3 – Valeurs de la fonction couleur $C$

L'évolution spatio-temporelle de $C$ est décrite par une équation de transport où $\vec{V}$ est la vitesse au point considéré :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \,.\, \nabla C = 0 \tag{2.1}$$

La fonction $C$ change brutalement de valeurs, d'où la nécessité d'utiliser un schéma numérique approprié qui puisse supporter ce changement abrupte. Les schémas numériques utilisés pour simuler des

chocs sont particulièrement adaptés mais nécesitent une formulation conservative de (2.1) :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \left(C\vec{V}\right) = C\nabla.\vec{V} \tag{2.2}$$

Dans le code numérique $\mathcal{JADIM}$ développé à l'Institut de Mécanique des Fluide de Toulouse, un schéma de type correcteur de flux implémenté pour la première fois par *Zalesak* [109] est utilisé pour résoudre (2.2). La résolution multidimensionnelle de (2.2) avec l'algorithme de *Zalesak* conserve la masse mais déforme l'interface de façon artificielle. *Benkenida* [3] a donc utilisé une méthode permettant de découpler l'équation suivant chacune des directions :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial Cu}{\partial x} = C\frac{\partial u}{\partial x} \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial Cv}{\partial y} = C\frac{\partial v}{\partial y} \tag{2.4}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial Cw}{\partial z} = C\frac{\partial w}{\partial z} \tag{2.5}$$

La discrétisation de ces équations découplées suivant les trois directions mène à une localisation plus précise de l'interface sans distorsion. Le problème de ce schéma est qu'il ne conserve pas la masse en raison de ce découplage. *Bonometti* [7] propose un algorithme permettant de résoudre ce problème en utilisant des techniques propres à la methode Level Set.

L'enjeu est à présent de résoudre les équations qui régissent l'écoulement. Pour évaluer les forces de capilarité, il est indispensable de connaitre la normale à l'interface notée $\vec{n}$ ; ce qui pose un problème puisque l'interface n'est pas localisée de façon précise avec la fonction $C$. Il faut donc déduire $\vec{n}$ à partir de $C$.

$$\vec{n} = \frac{\nabla C}{||\nabla C||} \tag{2.6}$$

La difficulté réside dans le fait de calculer une force sur un espace de dimension $n-1$ dans un domaine de dimension $n$ . *Brackbill et al.* proposent un algorithme qui lisse cet espace de dimension $n-1$ pour le transformer en espace « fin »suivant $\vec{n}$ et de dimension $n$ ce qui permet de calculer la force liée à la tension de surface.

Le fait de ne pouvoir localiser l'interface précisément dans la maille se répercute dans le calcul des grandeurs caractérisant l'interface tels que $\vec{n}$ ou la courbure $\kappa$ et les erreurs sur le calcul de la courbure génèrent des courants parasites. La méthode Level Set permet de localiser l'interface précisément dans la maille et de calculer la normale et la courbure simplement et précisément. C'est cette méthode Eulérienne qui est développée dans le code $\mathcal{DIVA}$ et qui a été utilisé au cours de cette thèse.

### 2.1.2 La méthode Level Set

*Osher et Sethian* [76, 88] ont développé la méthode Level set pour pallier aux limites des propriétés algébriques de la méthode VOF. Tout comme la méthode VOF, la Level Set est une méthode eulérienne qui utilise la fonction $\phi$ pour localiser l'interface. Cette fonction est continue, régulière et vérifie pour

tout domaine $\Omega$ partitionné en $\Omega^+$ et $\Omega^-$ :

$$\begin{cases} \phi > 0 & \text{dans } \Omega^+ \\ \phi < 0 & \text{dans } \Omega^- \\ \phi = 0 & \text{à l'interface} \end{cases} \tag{2.7}$$

La fonction distance signée à l'interface (négative dans $\Omega^-$, positive dans $\Omega^+$) remplit ces propriétés. De plus, cette fonction a une signification physique puisqu'elle donne la distance à l'interface en tout point et détermine le fluide dans lequel se trouve le point.

Cette fonction $\phi$ est transportée par la vitesse $\vec{V}$ de la même manière que la fonction couleur de la méthode VOF :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{V} \,.\, \nabla \phi = 0 \tag{2.8}$$

Dans le cas des écoulements incompressibles, l'équation (2.8) peut s'écrire de façon conservative :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \,.\, (\vec{V}\phi) = 0 \tag{2.9}$$

Les propriétés de l'interface telles que la normale $\vec{n}$ allant de $\Omega^-$ vers $\Omega^+$ et la courbure $\kappa$ peuvent donc se calculer précisément et simplement à partir de cette fonction :

$$\vec{n} = \frac{\nabla \phi}{||\nabla \phi||} \tag{2.10}$$

$$\kappa = -\nabla \,.\, \vec{n} \tag{2.11}$$

Une étape de réinitialisation est nécessaire pour s'assurer que la fonction $\phi$ conserve ses propriétés de fonction distance signée à l'interface dans tout le domaine de calcul. La méthode utilisée a été développée par *Sussman et al.* [94] et consiste à résoudre de manière itérative l'équation à dérivées partielles suivante :

$$\frac{\partial d}{\partial \tau} = sign(\phi)(1 - |\nabla d|) \tag{2.12}$$

Où $d$ est la fonction distance réinitialisée, $\tau$ un temps fictif de redistanciation et $sign(\phi)$ la fonction signe lissée définie dans [55, 94]. À la fin de chaque pas de temps physique, deux itérations temporelles fictives de l'équation de redistanciation (2.12) sont effectuées en utilisant un schéma temporel d'ordre 2 de type TVD Runge-Kutta.

Conserver les propriétés de distance signée de la fonction $\phi$ au voisinage de l'interface permet de garantir une bonne précision sur le calcul des propriétés géométriques de l'interface (normale et courbure).

L'équation de transport (2.8) est hyperbolique, elle peut donc développer des solution discontinues même si la condition initiale est régulière. Les solutions discontinues sont des solutions dites « faibles »dans le sens des distributions c'est à dire qu'elles sont solutions du problème intégral. Pour résoudre ces solutions discontinues, une viscosité numérique doit être ajoutée afin de lisser les discontinuités [101, 89]. La condition « d'entropie »va dépendre ici de la courbure $\kappa$ et permet de lisser les discontinuités afin d'éviter l'apparition d'angles sur l'interface.

Ce type de problèmes nécessite des schémas de discrétisation spécifiques qui permettent de gérer

d'éventuelles discontinuités. Les schémas numériques développés pour discrétiser les equations de propagation d'ondes de choc sont adaptés, en particuler le schéma WENO [2] développé par *Jiang et al.* [52].

La discrétisation temporelle est effectuée avec un schéma multipas de type Runge-Kutta d'ordre 2 ou 3. L'ordre $n$ du schéma peut être aussi élevé que nécessaire, mais si le temps de calcul pour l'ordre 1 est $\tau$, à l'ordre $n$ il est de $n\tau$, les ordres élevés peuvent donc s'avérer très couteux en temps de calcul.

**Discrétisation temporelle : Schémas de Runge-Kutta**

Condition de CFL :

Les schémas numériques utilisés dans le code de calcul $\mathcal{DIVA}$ sont explicites en temps. Pour être stables, de tels schémas de discrétisation d'équation hyperboliques doivent vérifier la condition de CFL [3] qui empêche le pas de temps de dépasser une certaine valeur sans quoi le schéma diverge. Dans le cas où le maillage n'est pas uniforme, la condition de CFL du schéma s'écrit :

$$\boxed{\Delta t \leqslant \frac{K}{\frac{max(|u_{i,j,k}|)}{min(\Delta x_i)} + \frac{max(|v_{i,j,k}|)}{min(\Delta y_j)} + \frac{max(|w_{i,j,k}|)}{min(\Delta z_k)}}} \tag{2.13}$$

Où $K$ est une constante à fixer comprise entre 0 et 1, la vitesse $\vec{V} = (u, v, w)$ et $u_{i,j,k}, v_{i,j,k}$ et $w_{i,j,k}$ sont les vitesses au point $(x_i, y_j, z_k)$ suivant $\vec{e}_x, \vec{e}_y$ et $\vec{e}_z$ respectivement.

Schéma d'Euler Explicite et condition de CFL :

Le schéma d'Euler explicite (ou schéma de Runge-Kutta d'ordre 1) est la méthode de discrétisation temporelle la plus simple et s'écrit, pour l'équation (2.8) :

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t \ (\vec{V}^n.\nabla)\phi^n \tag{2.14}$$

Le schéma d'Euler est certes très simple et rapide mais n'est pas assez précis pour les simulations effectuées dans cette thèse. C'est pourquoi les schémas de Runge-Kutta d'ordre plus élevés ont été utilisés [55].

Schéma de Runge-Kutta d'ordre 2 (RK2) :

Il existe plusieurs façons de choisir les coefficients pour faire un schéma de Runge-Kutta d'ordre 2. Celle qui a été implémentée dans le code de calcul $\mathcal{DIVA}$ et qui sera utilisée pour les simulations du chapitre 4 consiste d'abord à évaluer $\phi$ au temps $t^n + \Delta t$ avec un pas d'Euler :

$$\tilde{\phi}^{n+1} = \phi^n - \Delta t \ (\vec{V}^n.\nabla)\phi^n$$

2. WENO pour Weighted Essentially Non Oscillatory
3. CFL pour Courant-Friedreichs-Lewy

L'évaluation de $\phi$ au temps $t^n + 2\Delta t$, à savoir $\tilde{\phi}^{n+2}$, se fait à partir de l'estimation $\tilde{\phi}^{n+1}$ :

$$\tilde{\phi}^{n+2} = \tilde{\phi}^{n+1} - \Delta t \ (\vec{V}^{n+1}.\nabla)\tilde{\phi}^{n+1}$$

Finalement :

$$\phi^{n+1} = \frac{\phi^n + \tilde{\phi}^{n+2}}{2}$$

Schéma de Runge-Kutta d'ordre 3 (RK3) :

Pour des simulations plus précises, le schéma de Runge-Kutta d'ordre 3 peut être utilisé. Les deux premiers pas de ce schémas sont identiques au schéma RK2 :

$$\tilde{\phi}^{n+1} = \phi^n - \Delta t \ (\vec{V}^n.\nabla)\phi^n$$
$$\tilde{\phi}^{n+2} = \tilde{\phi}^{n+1} - \Delta t \ (\vec{V}^{n+1}.\nabla)\tilde{\phi}^{n+1}$$

En utilisant une pondération adéquate, la valeur de $\phi$ au temps $t^n + 1/2\Delta t$ peut être estimée :

$$\tilde{\phi}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3\phi^n + \tilde{\phi}^{n+2}}{4}$$

Le calcul de $\tilde{\phi}^{n+\frac{3}{2}}$ est ensuite effectué :

$$\tilde{\phi}^{n+\frac{3}{2}} = \tilde{\phi}^{n+\frac{1}{2}} - \Delta t \ (\vec{V}^{n+\frac{1}{2}}.\nabla)\tilde{\phi}^{n+\frac{1}{2}}$$

Finalement :

$$\phi^{n+1} = \frac{\phi^n + 2\tilde{\phi}^{n+\frac{3}{2}}}{3}$$

**Discrétisation spatiale : Schéma WENO5**

La discrétisation spatiale de l'équation de (2.8) doit être effectuée avec un schéma numérique pouvant prendre en compte les discontinuités. Les schémas centrés étant instables pour les équations hyperboliques, il faut donc utiliser des schémas décentrés. Plusieurs types de discrétisations décentrées ont été implémentés dans le code de calcul $\mathcal{DIVA}$ mais seuls ceux qui ont été utilisés pour effectuer les simulations sont présentés [98].

Schéma « Upwind » :

Le schéma « Upwind » est le schéma stable le plus simple et robuste. L'équation (2.8) est une équation de transport, i. e. qu'elle régit le déplacement de la quantité $\phi$ à la vitesse $\vec{V}$. Il est légitime de penser que la discrétisation des dérivées doit être effectuée avec les points d'où provient l'information. En effet,

dans le cas unidimensionnel, les valeurs de $\phi$ avancent dans le sens de $u$ d'où :

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial \phi}{\partial x}\right|_i \approx \dfrac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} & \text{si} \quad u_i > 0 \\ \\ \left.\dfrac{\partial \phi}{\partial x}\right|_i \approx \dfrac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x_i} & \text{si} \quad u_i \leqslant 0 \end{cases}$$

Le schéma « Upwind » se généralise dans le cas 3D en utilisant les composantes de vitesse suivant les directions $\vec{e}_x, \vec{e}_y$ et $\vec{e}_z$ :

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{i,j,k} \approx \dfrac{\phi_{i,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{\Delta x_{i-1}} \quad \text{si} \quad u_{i,j,k} > 0; & \left.\dfrac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{i,j,k} \approx \dfrac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i,j,k}}{\Delta x_i} \quad \text{si} \quad u_{i,j,k} \leqslant 0 \\ \\ \left.\dfrac{\partial \phi}{\partial y}\right|_{i,j,k} \approx \dfrac{\phi_{i,j,k} - \phi_{i,j-1,k}}{\Delta y_{j-1}} \quad \text{si} \quad v_{i,j,k} > 0; & \left.\dfrac{\partial \phi}{\partial y}\right|_{i,j,k} \approx \dfrac{\phi_{i,j+1,k} - \phi_{i,j,k}}{\Delta y_j} \quad \text{si} \quad v_{i,j,k} \leqslant 0 \\ \\ \left.\dfrac{\partial \phi}{\partial z}\right|_{i,j,k} \approx \dfrac{\phi_{i,j,k} - \phi_{i,j,k-1}}{\Delta z_{k-1}} \quad \text{si} \quad w_{i,j,k} > 0; & \left.\dfrac{\partial \phi}{\partial z}\right|_{i,j,k} \approx \dfrac{\phi_{i,j,k+1} - \phi_{i,j,k}}{\Delta z_k} \quad \text{si} \quad w_{i,j,k} \leqslant 0 \end{cases}$$

Ce schéma est certes stable, mais il n'est que d'ordre 1. De plus, il est très dissipatif c'est pourquoi un schéma d'ordre 5 du type WENO est utilisé pour discrétiser le terme convectif de l'équation de transport.

Schéma « WENO5 » :

Le schéma WENO est une extension moins dissipative du schéma ENO [4] développé par *Liu et al.* [62]. À la différence des schémas ENO, qui utilisent des approximations des dérivées là où la pente est la plus « adoucie »(ce qui les rend dissipatifs), les schémas WENO utilisent toutes les approximations des dérivés avec des pondérations. Ces pondérations sont fortes pour les pentes « douces »et faibles pour les pentes « raides », là où il peut y avoir une discontinuité.

*Jiang and Shu* [52] montrent qu'en utilisant le même stencil qu'un schéma ENO d'ordre $r$, le schéma WENO est d'ordre $r+1$, ce qui le rend plus rapide à précision égale. La discrétisation du terme convectif sous sa forme non conservative s'écrit :

$$\begin{aligned} \left(\vec{V}.\nabla\right)\phi &= u\frac{\partial \phi}{\partial x} + v\frac{\partial \phi}{\partial y} + w\frac{\partial \phi}{\partial z} \\ \left(\vec{V}.\nabla\right)\phi\Big|_{i,j,k} &= u_{i,j,k}\boxed{\left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{i,j,k}} + v_{i,j,k}\left.\frac{\partial \phi}{\partial y}\right|_{i,j,k} + w_{i,j,k}\left.\frac{\partial \phi}{\partial z}\right|_{i,j,k} \end{aligned}$$

Par la suite, seul le calcul de la dérivée de $\phi$ suivant $\vec{e}_x$ est explicité, le lecteur pourra aisément déduire le calcul des dérivées suivant les autres directions. La première étape consiste à définir les dérivées suivant

4. ENO pour Essentially Non Oscillatory. Ces schémas ont été développés par *Harten & Osher* [42] et *Harten et al.* [41].

$\vec{e}_x$ sur les points du stencil avec une discrétisation décentrée à l'ordre 1 :

$$d_1^- = \frac{\phi_{i-2,j,k} - \phi_{i-3,j,k}}{\Delta x_{i-3}} \qquad d_1^+ = \frac{\phi_{i+3,j,k} - \phi_{i+2,j,k}}{\Delta x_{i+2}}$$

$$d_2^- = \frac{\phi_{i-1,j,k} - \phi_{i-2,j,k}}{\Delta x_{i-2}} \qquad d_2^+ = \frac{\phi_{i+2,j,k} - \phi_{i+1,j,k}}{\Delta x_{i+1}}$$

$$d_3^- = \frac{\phi_{i,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{\Delta x_{i-1}} \qquad d_3^+ = \frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i,j,k}}{\Delta x_i}$$

$$d_4^- = \frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i,j,k}}{\Delta x_i} \qquad d_4^+ = \frac{\phi_{i,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{\Delta x_{i-1}}$$

$$d_5^- = \frac{\phi_{i+2,j,k} - \phi_{i+1,j,k}}{\Delta x_{i+1}} \qquad d_5^+ = \frac{\phi_{i+3,j,k} - \phi_{i+2,j,k}}{\Delta x_{i+2}}$$

La deuxième étape consiste à définir les coefficients de pondération $\omega_i^\pm$ qui dépendent des valeurs $d_i^\pm$. Pour cela, il faut d'abord définir les variables intermédiaires :

$$S_1^\pm = \frac{13}{12}\left(d_1^\pm - 2d_2^\pm + d_3^\pm\right)^2 + \frac{1}{4}\left(d_1^\pm - 4d_2^\pm + 3d_3^\pm\right)^2 \qquad \alpha_1^\pm = \frac{1}{10\left(\varepsilon + S_1^\pm\right)^2}$$

$$S_2^\pm = \frac{13}{12}\left(d_2^\pm - 2d_3^\pm + d_4^\pm\right)^2 + \frac{1}{4}\left(d_2^\pm - d_4^\pm\right)^2 \qquad \alpha_2^\pm = \frac{6}{10\left(\varepsilon + S_2^\pm\right)^2}$$

$$S_3^\pm = \frac{13}{12}\left(d_3^\pm - 2d_4^\pm + d_5^\pm\right)^2 + \frac{1}{4}\left(d_5^\pm - 4d_4^\pm + 3d_3^\pm\right)^2 \qquad \alpha_1^\pm = \frac{3}{10\left(\varepsilon + S_3^\pm\right)^2}$$

La variable $\varepsilon$ est une valeur très faible à fixer pour éviter que le dénominateur ne s'annule. Dans le code $\mathcal{DIVA}$ $\varepsilon$ vaut $10^{-12}$. Finalement, les pondérations s'écrivent :

$$\omega_1^\pm = \frac{\alpha_1^\pm}{\alpha_1^\pm + \alpha_2^\pm + \alpha_3^\pm}$$

$$\omega_2^\pm = \frac{\alpha_2^\pm}{\alpha_1^\pm + \alpha_2^\pm + \alpha_3^\pm}$$

$$\omega_3^\pm = \frac{\alpha_3^\pm}{\alpha_1^\pm + \alpha_2^\pm + \alpha_3^\pm}$$

L'approximation de la dérivée à gauche s'écrit :

$$\left.\frac{D\phi}{Dx}\right|^{-}_{i,j,k} = \omega_1^- \left(\frac{d_1^-}{3} - \frac{7d_2^-}{6} + \frac{11d_3^-}{3}\right) + \omega_2^- \left(-\frac{d_2^-}{6} + \frac{5d_3^-}{6} + \frac{d_4^-}{3}\right) + \omega_3^- \left(\frac{d_3^-}{3} + \frac{5d_4^-}{6} - \frac{d_5^-}{6}\right)$$

La dérivée à droite s'écrit de façon analogue en remplaçant les indices « - »par des indices « + ». En conclusion, l'approximation de la dérivée suivant $\vec{e}_x$ s'écrit :

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_{i,j,k} \approx \begin{cases} \left.\dfrac{D\phi}{Dx}\right|^{-}_{i,j,k} & \text{si} \quad u_{i,j,k} > 0 \\ \\ \left.\dfrac{D\phi}{Dx}\right|^{+}_{i,j,k} & \text{si} \quad u_{i,j,k} \leqslant 0 \end{cases} \tag{2.15}$$

## 2.2 Méthode de Projection pour la résolution des équations de Navier-Stokes

Un écoulement est considéré incompressible lorsque sa masse volumique est constante dans ce fluide et dans le temps. Les équations de Navier-Stokes et de conservation de la masse pour un écoulement incompressible s'écrivent :

$$\rho\left(\frac{\partial\vec{V}}{\partial t} + (\vec{V}.\nabla)\vec{V}\right) = -\nabla P + \nabla.(2\mu\bar{\bar{D}}) + \rho\vec{g} \tag{2.16}$$

$$\nabla.\vec{V} = 0 \tag{2.17}$$

Où $\rho$ représente la masse volumique, $P$ la pression, $\mu$ la viscosité dynamique, $\bar{\bar{D}}$ le tenseur des déformations et $\vec{g}$ l'accélération de la pesanteur. Le tenseur des déformations est fonction de la vitesse $\vec{V}$ et s'écrit :

$$\bar{\bar{D}} = \frac{1}{2}\left(\nabla\vec{V} + \nabla^t\vec{V}\right) \tag{2.18}$$

Ces deux équations permettent de calculer le champ de vitesse et de pression dans les fluides. De nombreuses méthodes ont été développées pour résoudre numériquement ces équations. Par exemple, les approches de type spectral comme la méthode de Galerkin Discontinue sont particulièrement adaptées pour la résolution des équations en éléments finis. L'objectif de ces méthodes est de décomposer la solution approchée dans une base de fonctions, l'ordre de la méthode est d'autant plus élevé que la base a d'éléments.

La méthode de compressibilité artificielle développée par *Chorin* [14] consiste à résoudre un système d'équations intermédiaire avec une compressibilité artificielle, ce système tendant vers le système d'équations incompressible à l'état stationnaire. Initialement développée pour les écoulements visqueux stationnaires, la méthode a ensuite été étendue pour les écoulements instationnaires.

Dans la littérature, bien d'autres approches ont été développées mais c'est la méthode de projection très rapide et maniable pour les maillages cartésiens qui a été choisie pour résoudre ces équations.

### 2.2.1 Méthode de Projection pour un écoulement monophasique

La méthode de projection consiste à calculer une vitesse intermédiaire qui ne respecte pas la condition de divergence nulle. La pression est ensuite calculée à partir de cette vitesse intermédiaire pour finalement la projeter dans un espace de vecteurs solénoïdaux. La discrétisation temporelle de l'équation de Navier-Stokes et de la continuité est effectuée dans un premier temps :

$$\frac{\vec{V}^{n+1}-\vec{V}^{n}}{\Delta t}+(\vec{V}^{n}.\nabla)\vec{V}^{n} = -\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho}+\frac{1}{\rho}\nabla.(2\mu\bar{\bar{D}})^{n}+\vec{g} \tag{2.19}$$

$$\nabla.\vec{V}^{n+1} = 0 \tag{2.20}$$

Pour un écoulement monophasique la viscosité est constante, le terme lié à la viscosité peut donc s'écrire en fonction de $\vec{V}$ en utilisant la relation (2.17) :

$$\nabla.\left(2\mu\bar{\bar{D}}\right)=\mu\boldsymbol{\Delta}\vec{V}$$

En regroupant les termes connus au temps $t^n$, il est possible de définir une vitesse intermédiaire $\vec{V}^*$ (2.21) qui, d'après (2.19) s'écrit aussi (2.22) :

$$\vec{V}^{*} = V^{n}-\Delta t\left((\vec{V}^{n}.\nabla)\vec{V}^{n}-\frac{\mu}{\rho}\boldsymbol{\Delta}\vec{V}^{n}-\vec{g}\right) \tag{2.21}$$

$$\vec{V}^{*} = \vec{V}^{n+1}+\frac{\Delta t}{\rho}\nabla P^{n+1} \tag{2.22}$$

Dans le cas des écoulements monophasiques où la masse volumique est constante, le rotationnel du dernier terme de la relation (2.22) s'écrit :

$$\nabla\times\left(\frac{\Delta t}{\rho}\nabla P^{n+1}\right)=\frac{\Delta t}{\rho}\nabla\times\left(\nabla P^{n+1}\right)=0$$

L'équation (2.19) est donc une décomposition de Helmholtz-Hodge de $\vec{V}^*$ car $V^{n+1}$ est un champ solenoïdal d'après (2.20) et $\frac{\Delta t}{\rho}\nabla P^{n+1}$ est irrotationnel. L'algorithme de projection utilisé pour résoudre les équations de Navier-Stokes d'un écoulement monophasique s'appuie sur cette observation. Les étapes de cet algorithme sont listées ci-après :

1. Calcul de $V^*$ avec la relation (2.21). Le terme visqueux peut être traité de manière implicite afin de s'affranchir de la condition de CFL liée à la viscosité qui est très restrictive (*Cf* partie 2.2.3). Le terme de convection est quant à lui souvent traité explicitement pour les écoulements instationnaires avec un schéma de type WENO5 dans le cas de la présente étude.

2. La pression qui est calculée ici est une valeur purement dynamique. Connaissant $V^*$ et en appliquant l'opérateur divergence à la relation (2.19), $P$ est donnée par l'équation de Poisson suivante :

$$\boldsymbol{\Delta}P^{n+1}=\rho\frac{\nabla.V^{*}}{\Delta t} \tag{2.23}$$

3. Finalement, le champ de vitesse $V^{n+1}$ à divergence nulle est donné par la relation suivante :

$$\vec{V}^{n+1} = V^* - \frac{\Delta t}{\rho}\nabla P^{n+1} \tag{2.24}$$

La discrétisation spatiale de cette méthode dans le cas monophasique est réalisée avec une méthode de type « Volume Finis » dans un maillage MAC.

### 2.2.2 Discrétisations spatiales pour la méthode de projection

La discrétisation est effectuée sur un maillage non-uniforme implémenté dans le code $\mathcal{DIVA}$. Dans les simulations effectuées et présentées dans le chapitre 4, le maillage est très resserré au voisinage de la paroi pour bien capturer l'écoulement dans la couche de vapeur.

Ce maillage non uniforme de type « MAC » est représenté sur la Fig. 2.4. La pression, la température et la fraction massique (*Cf* Chapitre 3) seront également calculées sur le maillage central et les points de ce maillage sont repérés par les indices $i, j$ et $k$. Les coordonnées des points de discrétisation du maillage central sont $x_i, y_j$ et $z_k$ suivant les directions $\vec{e}_x, \vec{e}_y$ et $\vec{e}_z$ respectivement. La longueur des pas d'espace suivant les directions $\vec{e}_x, \vec{e}_y$ et $\vec{e}_z$ est fonction de ces coordonnées et s'écrit :

$$\begin{cases} \Delta x_i &= x_{i+1} - x_i \\ \Delta y_j &= y_{j+1} - y_j \\ \Delta z_k &= z_{k+1} - z_k \end{cases} \tag{2.25}$$

Les composantes des vitesses sont calculées dans des maillages différents, décalés d'une demi maille par rapport au maillage central. La composante de la vitesse suivant la direction $\vec{e}_x$, $u$, est calculée sur les points de coordonnées $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, z_k)$ :

$$\begin{cases} x_{i-\frac{1}{2}} &= x_i - \dfrac{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}}{2} \\ \Delta x_{i-\frac{1}{2}} &= \dfrac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2} \end{cases} \tag{2.26}$$

De même, les composantes des vitesses suivant $\vec{e}_y$ et $\vec{e}_z$, $v$ et $w$, sont calculées sur les points $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, z_k)$ et $(x_i, y_j, z_{k-\frac{1}{2}})$ :

$$\begin{cases} y_{j-\frac{1}{2}} &= y_j - \dfrac{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}}{2} \qquad z_{k-\frac{1}{2}} &= z_k - \dfrac{\Delta z_{k-\frac{1}{2}}}{2} \\ \Delta y_{j-\frac{1}{2}} &= \dfrac{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j}{2} \qquad \Delta z_{k-\frac{1}{2}} &= \dfrac{\Delta z_{k-1} + \Delta z_k}{2} \end{cases} \tag{2.27}$$

C'est à l'aide des variables définies précedemment que les équations de Navier-Stokes et de continuité seront discrétisées.

### Calcul de $\vec{V}^*$

La discrétisation en deux dimensions est présentée dans cette partie, l'extension en 3D étant facilement réalisable. Le calcul de la vitesse $\vec{V}^* = (u^*, v^*, w^*)$ peut être effectué de façon indépendante suivant chacune des directions $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$ et éventuellement $\vec{e}_z$ en 3D :

$$u^* = u^n - \Delta t \left( (\vec{V}^n.\nabla)u^n - \frac{\mu}{\rho}\mathbf{\Delta} u^n - g^x \right) \tag{2.28}$$

$$v^* = v^n - \Delta t \left( (\vec{V}^n.\nabla)v^n - \frac{\mu}{\rho}\mathbf{\Delta} v^n - g^y \right) \tag{2.29}$$

Les variables $(u^*, u)$ et $(v, v^*)$ sont calculées dans des maillages différents, décalés d'une demi-maille centrés au point $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$ et $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$ respectivement (*cf* Fig. 2.4).

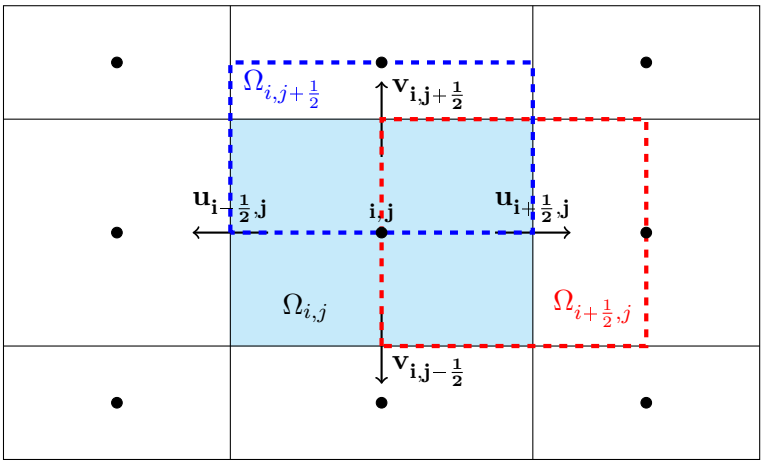



FIGURE 2.4 – Maillage de type MAC non uniforme en 2 dimensions

Une méthode de type Volumes Finis est utilisée pour discrétiser les équations (2.28) et (2.29) mixéeà des différences finies pour les termes convectifs calculés avec des schémas WENO5 sous forme non conservative. Les équations sont donc intégrées sur les mailles $\Omega_{i+\frac{1}{2},j}$ et $\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}$ respectivement (*cf* Fig. 2.4).

$$\int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} u^* d\Omega = \int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} \left[ u^n - \Delta t \left( (\vec{V}^n.\nabla)u^n - \frac{\mu}{\rho}\mathbf{\Delta} u^n - g^x \right) \right] d\Omega \tag{2.30}$$

$$\int_{\Omega_{i,j+\frac{1}{2},j}} v^* d\Omega = \int_{\Omega_{i,j+\frac{1}{2},j}} \left[ v^n - \Delta t \left( (\vec{V}^n.\nabla)v^n - \frac{\mu}{\rho}\mathbf{\Delta} v^n - g^y \right) \right] d\Omega \tag{2.31}$$

Les volumes des mailles $\Omega_{i+\frac{1}{2},j}$ et $\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}$ sont notés $\mathcal{V}_{i+\frac{1}{2},j}$ et $\mathcal{V}_{i,j+\frac{1}{2}}$. En appliquant le théorème de

Green-Ostrogradski sur le laplacien des vitesses, la discrétisation s'écrit :

$$u^*_{i+\frac{1}{2},j}\mathcal{V}_{i+\frac{1}{2},j} = u^n_{i+\frac{1}{2},j}\mathcal{V}_{i+\frac{1}{2},j} - \Delta t \left( \underbrace{(\vec{V}^n.\nabla)u^n\Big|_{i+\frac{1}{2},j}}_{A} \mathcal{V}_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{\mu}{\rho}\int_{\partial\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} \nabla u^n \,.\, \vec{n}dS - g^x_{i+\frac{1}{2},j}\mathcal{V}_{i+\frac{1}{2},j} \right)$$

$$v^*_{i,j+\frac{1}{2}}\mathcal{V}_{i,j+\frac{1}{2}} = v^n_{i,j+\frac{1}{2}}\mathcal{V}_{i,j+\frac{1}{2}} - \Delta t \left( \underbrace{(\vec{V}^n.\nabla)v^n\Big|_{i,j+\frac{1}{2}}}_{A'} \mathcal{V}_{i,j+\frac{1}{2}} - \frac{\mu}{\rho}\int_{\partial\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} \nabla v^n \,.\, \vec{n}dS - g^y_{i,j+\frac{1}{2}}\mathcal{V}_{i,j+\frac{1}{2}} \right)$$

La discrétisation des termes $A$ et $A'$ est effectuée avec la méthode WENO5 utilisée pour résoudre l'équation d'évolution de la fonction Level Set (2.8). Les volumes des mailles décalées s'écrivent :

$$\mathcal{V}_{i+\frac{1}{2},j} = \Delta x_i \; \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \tag{2.32}$$

$$\mathcal{V}_{i,j+\frac{1}{2}} = \Delta x_{i-\frac{1}{2}} \; \Delta y_j \tag{2.33}$$

Le coefficient de viscosité et la masse volumique étant considérés constants, le terme lié à la viscosité est discrétisé comme suit :

$$\frac{\mu}{\rho}\int_{\partial\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} \nabla u^n \,.\, \vec{n}dS \approx \frac{\mu}{\rho}\left( -\frac{u^n_{i+\frac{1}{2},j} - u^n_{i+\frac{1}{2},j-1}}{\Delta y_{j-1}}\Delta x_i + \frac{u^n_{i+\frac{3}{2},j} - u^n_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}}\Delta y_{j-\frac{1}{2}} + \right.$$
$$\left. \frac{u^n_{i+\frac{1}{2},j} - u^n_{i+\frac{1}{2},j+1}}{\Delta y_j}\Delta x_i - \frac{u^n_{i+\frac{1}{2},j} - u^n_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}}\Delta y_{j-\frac{1}{2}} \right) \tag{2.34}$$

$$\frac{\mu}{\rho}\int_{\partial\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} \nabla v^n \,.\, \vec{n}dS \approx \frac{\mu}{\rho}\left( -\frac{v^n_{i,j+\frac{1}{2}} - v^n_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}}\Delta x_{i-\frac{1}{2}} + \frac{v^n_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v^n_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i}\Delta y_j + \right.$$
$$\left. \frac{v^n_{i,j+\frac{3}{2}} - v^n_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta y_{j+\frac{1}{2}}}\Delta x_{i-\frac{1}{2}} - \frac{v^n_{i,j+\frac{1}{2}} - v^n_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i-1}}\Delta y_j \right) \tag{2.35}$$

**Calcul de $P^{n+1}$**

La résolution de l'équation de Poisson (2.23) est effectuée avec la même méthode de discrétisation que le terme de viscosité :

$$\begin{aligned}\int_{\Omega_{i,j}} \boldsymbol{\Delta} P^{n+1} d\Omega &= \int_{\partial\Omega_{i,j}} \nabla P^{n+1}.\vec{n} dS \\ &\approx -\frac{P^{n+1}_{i,j} - P^{n+1}_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1}} \Delta x_{i-\frac{1}{2}} + \frac{P^{n+1}_{i+1,j} - P^{n+1}_{i,j}}{\Delta x_i} \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \\ &\quad + \frac{P^{n+1}_{i,j+1} - P^{n+1}_{i,j}}{\Delta y_j} \Delta x_{i-\frac{1}{2}} - \frac{P^{n+1}_{i,j} - P^{n+1}_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1}} \Delta y_{j-\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

Cette fois, la discrétisation conduit à la résolution d'un système linéaire $AP = F$ où $A$ est une matrice à 5 diagonales non nulles en 2D (et 7 en 3D), $P$ est le vecteur des valeurs de la pression sur les points du maillage, $F$ le terme source et $l = i + (j-1)N_x$.

$$\begin{aligned}P_l &= P^n_{i,j} \\ F_l &= -\frac{\rho}{\Delta t}\, \mathcal{V}_{i,j} \left( \frac{u^*_{i+\frac{1}{2},j} - u^*_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{v^*_{i,j+\frac{1}{2}} - v^*_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}} \right)\end{aligned}$$

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}^m_1 & \mathcal{A}^+_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \mathcal{B}^+_1 & 0 & \dots & \dots \\ \mathcal{A}^-_2 & \mathcal{A}^m_2 & \mathcal{A}^+_2 & 0 & \dots & \dots & 0 & \mathcal{B}^+_2 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathcal{B}^-_{Nx} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \mathcal{B}^-_l & \dots & 0 & \mathcal{A}^-_l & \mathcal{A}^m_l & \mathcal{A}^+_l & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{A}^+_l = -\frac{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} \qquad \mathcal{A}^-_l = -\frac{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i-1}}$$

$$\mathcal{B}^+_l = -\frac{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta y_j} \qquad \mathcal{B}^-_l = -\frac{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta y_{j-1}}$$

$$\mathcal{A}^m_l = -\left(\mathcal{A}^+_l + \mathcal{A}^-_l + \mathcal{B}^+_l + \mathcal{B}^-_l\right)$$

La matrice $A$ est symétrique et définie positive, ce qui permet d'utiliser des méthodes itératives d'inversion matricielle plus rapides et adaptées à ce type de matrices. La matrice est donc inversée avec un algorithme de « Gradient Conjugué préconditionné par une factorisation incomplète de Cholesky (ICCG) ».

**Calcul de $\vec{V}^{n+1}$**

Finalement, à partir du calcul de la pression dynamique $P^{n+1}$, il est possible de calculer $\vec{V}^{n+1}$. Les composantes de la vitesse sont calculées sur le maillage MAC, donc la discrétisation de l'équation (2.24)

devient :

$$\left\{\begin{array}{rcl} u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} & = & u_{i+\frac{1}{2},j}^{*} - \dfrac{\Delta t}{\rho}\left.\dfrac{\partial P}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2},j} \\ & & \\ & = & u_{i+\frac{1}{2}}^{*} - \dfrac{\Delta t}{\rho}\dfrac{P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i}^{n+1}}{\Delta x_i} \end{array}\right. \tag{2.36}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} & = & v_{i,j+\frac{1}{2}}^{*} - \dfrac{\Delta t}{\rho}\left.\dfrac{\partial P}{\partial y}\right|_{i,j+\frac{1}{2}} \\ & & \\ & = & v_{i,j+\frac{1}{2}}^{*} - \dfrac{\Delta t}{\rho}\dfrac{P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta y_j} \end{array}\right. \tag{2.37}$$

### 2.2.3 Critère de restriction du pas de temps

Les schémas explicites doivent vérifier une condition de CFL pour assurer leur stabilité. Cette condition impose une restriction du pas de temps qui dépend de la taille des mailles et des termes traités de façon explicite. Dans le cas monophasique ces termes sont la convection et la viscosité. Une dernière condition s'ajoute dans le cas diphasique liée au terme de capillarité. D'après *Kang et al.* [55], le pas de temps doit respecter toutes les conditions décrites ci-après pour que le schéma soit stable.

1. Le terme lié à la convection induit la restriction suivante :

$$\Delta t_{conv} \leqslant \frac{K_1}{\frac{M(|u_{i,j,k}|)}{m(\Delta x_i)} + \frac{M(|v_{i,j,k}|)}{m(\Delta y_j)} + \frac{M(|w_{i,j,k}|)}{m(\Delta z_k)}} = \frac{1}{C_{cfl}} \tag{2.38}$$

   Notez que c'est la même condition imposée pour l'équation de transport de la fonction Level-Set. Les fonctions $M(\ .\ )$ et $m(\ .\ )$ sont les fonctions Max( . ) et min( . ) qui renvoient les valeurs maximum et minimum des séries de nombres en argument.

2. Le pas de temps est aussi contraint par une condition liée au terme visqueux :

$$\Delta t_{visc} \leqslant \frac{K_2}{M\left(\frac{\mu^-}{\rho^-}, \frac{\mu^+}{\rho^+}\right)\left(\frac{2}{m(\Delta x_i^2)} + \frac{2}{m(\Delta y_j^2)} + \frac{2}{m(\Delta z_k^2)}\right)} = \frac{1}{V_{cfl}} \tag{2.39}$$

3. Enfin, pour les écoulements diphasiques, la contrainte sur le pas de temps liée au terme capillaire dépend de la courbure et s'écrit :

$$\Delta t_{tens} \leqslant \frac{K_4}{4}\sqrt{\frac{M(\rho^+, \rho^-)m(\Delta x_i, \Delta y_j, \Delta z_k)^3}{\sigma}} = \frac{1}{S_{cfl}} \tag{2.40}$$

Les coefficients $K_1, K_2, K_3$ et $K_4$ sont compris entre 0 et 1 et imposés par l'utilisateur. Finalement, le critère de restriction générale du pas de temps s'écrit :

$$\boxed{\frac{1}{\Delta t} \geqslant \frac{1}{\Delta t_{conv}} + \frac{1}{\Delta t_{visc}} + \frac{1}{\Delta t_{tens}}} \tag{2.41}$$

La démonstration mathématique de la pertinence de la méthode de projection est donnée dans le cas monophasique mais il est possible d'utiliser cet algorithme dans le cas diphasique. Le problème est alors plus complexe puisqu'il faut prendre en compte la discontinuité de certaines variables à l'interface. De plus, un nouveau terme lié à la tension de surface et s'appliquant sur l'interface s'ajoute au bilan des forces. Les modifications de la méthode de projection sont présentés dans la partie suivante notamment le traitement du terme lié à la viscosité.

## 2.3 Méthode de projection pour les écoulements diphasiques et traitement du terme visqueux

Dans les premiers travaux concernant la simulation numérique des écoulements diphasiques incompressibles avec des méthodes lagrangiennes ou eulériennes de capture de l'interface, les discontinuités du champ de pression, de masse volumique ou de viscosité étaient imposées en lissant les termes singuliers à l'interface sur une distance de 2 à 3 mailles. Cette approche a été utilisée par *Brackbill et al.* [10] et *Unverdi et Tryggvason* [100] pour des méthodes de Front Tracking, par *Gueyffier et al.* [38] et *Lafaurie et al.* [58] pour les méthodes VOF et par *Sussman et al.* [94] pour les méthodes level set. Ces méthodes de lissage sont appelées « Continuous Surface Force method » ou « Delta-Function method »dans la littérature.

Ces méthodes donnent des résultats satisfaisants dans beaucoup de situations, mais dans le cas des écoulements à grands nombres capillaires elles sont susceptibles de développer de forts courants parasites qui produisent des instabilités. De plus, elles supposent le lissage de l'interface qui est par définition un domaine singulier. Une nouvelle méthode où les termes singuliers à l'interface sont considérés comme des conditions de saut est apparue il y a quelques années dans la littérature. Elle permet de considérer l'interface comme un domaine singulier et diminue les courants parasites.

De nombreuses contributions à l'amélioration de cette méthode, appelée « Sharp Interface Method » ont été effectués par *Popinet et Zaleski* [80] pour des méthodes de Front-Tracking ; par *Kang et al.* , *Liu et al.* et *Sussman et al.* [55, 61, 95] pour les méthodes Level Set et *François et al.* [15] pour les méthodes VOF. Dans [95], les auteurs utilisent une méthode couplée de type VOF/Level Set mais la façon d'imposer la condition de saut ne dépend que de la fonction Level Set (la fonction couleur de la méthode VOF est utilisée pour améliorer le transport de l'interface et pour calculer la courbure).

La plupart de ces études portent sur les améliorations effectués sur le terme de tension de surface mais ne donnent aucune indication sur l'efficacité de la méthode Sharp Interface sur le traitement du terme de viscosité même si dans [55] les auteurs proposent une nouvelle discrétisation qui utilise la méthode Ghost Fluid [25, 61] pour prendre en compte le terme lié à la viscosité.

Dans l'approche de *Kang et al.*, les auteurs s'affranchissent de l'opérateur de divergence des contraintes visqueuses en utilisant le laplacien des vitesses à la place. Cette transformation n'est possible que si l'écoulement est incompressible et la viscosité constante, elle n'est donc pas adaptée *a priori* pour discrétiser le terme de viscosité au voisinage de l'interface. Pour y remédier, *Kang et al.* rajoutent explicitement la contribution des termes visqueux dans le saut de pression lors de la résolution de l'équation de Poisson sur la pression.

Dans [95], *Sussman et al.* proposent une approche différente mais qui s'appuie également sur les travaux de *Liu et al.* [61]. Comme pour l'approche « Continuous Surface Force method », les auteurs discrétisent l'expression complète du terme visqueux (la divergence des contraintes visqueuses) mais

contrairement à *Kang et al.*, ils ne modifient pas la condition de saut sur la pression. Des cas test permettant de valider ces méthodes numériques sont également proposés : l'ascension d'une bulle déformée ou des instabilités capillaires.

Par analogie avec les appellations « Primitive form » et « Conservative form »utilisées pour caractériser la méthode de discrétisation du terme convectif, les méthodes de *Kang et al.* et de *Sussman et al.* seront appelées respectivement « Ghost Fluid Primitive Viscous method » et « Ghost Fluid Conservative Viscous method »dans la suite de ce document.

La partie 2.3.1 de ce chapitre montre que ces deux approches sont consistantes et equivalentes d'un point de vue continu. À partir de cette démonstration, une nouvelle méthode intermédiaire est proposée. Cette méthode permet à la fois de prendre en compte les changements de phase et de traiter le terme visqueux de manière implicite, ce qui est difficilement réalisable, voire impossible, avec les deux autres approches. Elle sera appelée « Ghost Fluid semi-conservative viscous method »dans ce chapitre.

Seules les discrétisation temporelles des méthodes sont exposées dans cette partie puisque les discrétisations spatiales font l'objet de la partie 2.4.

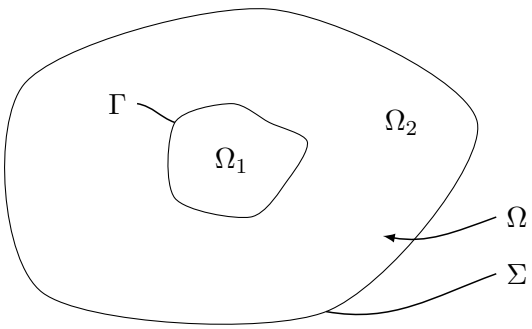
### 2.3.1 Prise en compte d'un terme source singulier comme une condition de saut à l'interface

Cette partie permet de démontrer l'équivalence entre l'équation de Poisson avec un terme source singulier et l'équation de Poisson avec une condition de saut à l'interface. Ce résultat permettra de montrer l'équivalence entre les approches « Ghost Fluid Primitive Viscous method » et « Ghost Fluid Conservative Viscous method »qui seront détaillées par la suite.

Quand les informations à disposition sont sur un maillage fixe cartésien d'un domaine à $n$ dimensions, il est difficile de discrétiser un terme source « singulier » (i. e. qui s'applique sur un espace de dimension $m < n$). Plusieurs solutions sont envisageables pour prendre en compte un tel terme. La méthode CSF par exemple, préconise le lissage de cet espace de dimension $m$ pour le transformer en espace « fin » de dimension $n$, permettant ainsi la discrétisation.

La méthode Ghost-Fluid permet de prendre en compte des phénomènes locaux sous forme de conditions de saut à l'interface tout en gardant leur caractère singulier. L'objectif est ici de démontrer qu'un terme source singulier peut être traité comme une condition de saut à l'interface dans le cas des équations de Laplace.

Soit $\Omega$ un domaine, $\Sigma$ sa frontière et $\{\Omega_1, \Omega_2\}$ une partition de $\Omega$. Les sous domaines $\Omega_1$ et $\Omega_2$ sont séparés par la surface $\Gamma$ de telle sorte que $\Gamma \cap \Sigma = \varnothing$. Les vecteurs $\vec{n}_\Sigma, \vec{n}_1$ et $\vec{n}_2$ sont les normales extérieures à $\Omega$ et intérieures à $\Omega_1$ et $\Omega_2$ respectivement.



La fonction $\varphi$ est continue par morceaux dans les sous-domaines $\Omega_1$ et $\Omega_2$ et vérifie l'équation de Laplace suivante :

$$\boldsymbol{\Delta}\varphi = 0 \tag{2.42}$$

L'équation est accompagnée d'une condition de saut à l'interface entre $\Omega_1$ et $\Omega_2$ :

$$[\ \varphi\ ]_\Gamma = \varphi_2 - \varphi_1 = a(\vec{x}_\Gamma) \tag{2.43}$$

Où $\varphi_1$ et $\varphi_2$ sont les valeurs de $\varphi$ de part et d'autre de l'interface dans $\Omega_1$ et $\Omega_2$ respectivement, $a$ est une fonction définie à l'interface et $\vec{x}_\Gamma$ est un point sur l'interface. L'intégration de cette équation sur la surface $\Gamma$ s'écrit :

$$\int_\Gamma \left([\ \varphi\ ]_\Gamma - a(\vec{x}_\Gamma)\right)\vec{n}_1 dS = \vec{0} \tag{2.44}$$

En remarquant que si $\varphi$ est homogène sur les frontières du domaine fermé $\Sigma$ alors :

$$\int_\Sigma \varphi\ \vec{n}_\Sigma dS = 0 \tag{2.45}$$

L'équation suivante découle des relations (2.44) et (2.45) :

$$\int_\Sigma \varphi\ \vec{n}_\Sigma dS + \int_\Gamma \left([\ \varphi\ ]_\Gamma - a(\vec{x}_\Gamma)\right)\vec{n}_1 dS = \vec{0} \tag{2.46}$$

$$\Rightarrow \int_\Sigma \varphi\ \vec{n}_\Sigma dS + \int_\Gamma \varphi_2\ \vec{n}_1 dS - \int_\Gamma \varphi_1\ \vec{n}_1 dS - \int_\Gamma a(\vec{x}_\Gamma)\vec{n}_1 dS \tag{2.47}$$

Comme $\vec{n}_1 = -\vec{n}_2$ :

$$\underbrace{\int_\Sigma \varphi\ \vec{n}_\Sigma dS + \int_\Gamma \varphi_2\ \vec{n}_1 dS}_{A} + \int_\Gamma \varphi_1\ \vec{n}_2 dS = \int_\Gamma a(\vec{x}_\Gamma)\vec{n}_1 dS \tag{2.48}$$

Comme la frontière de $\Omega_2$ est $\Gamma \cup \Sigma$, l'application du théorème du gradient permet d'obtenir une loi sur le volume :

$$A = \int_{\Omega_2} \nabla\varphi d\Omega \tag{2.49}$$

$$\Rightarrow \int_{\Omega_1} \nabla\varphi d\Omega + \int_{\Omega_2} \nabla\varphi d\Omega = \int_\Omega \nabla\varphi d\Omega = \int_\Omega a(\vec{x}_\Gamma)\vec{n}_1\delta_\Gamma d\Omega \tag{2.50}$$

Une loi locale découle de cette équation :

$$\nabla\varphi = a(\vec{x}_\Gamma)\vec{n}_1\delta_\Gamma$$

$$\Rightarrow \quad \boldsymbol{\Delta}\varphi = \nabla\ .\ (a(\vec{x}_\Gamma)\vec{n}_1\delta_\Gamma) \tag{2.51}$$

Il a finalement été démontré qu'imposer un terme source du type $\nabla\ .\ (a(\vec{x}_\Gamma)\vec{n}_1\delta_\Gamma)$ dans le second membre de l'équation de Laplace équivaut à imposer une condition de saut du type $[\ \varphi\ ]_\Gamma = a(\vec{x}_\Gamma)$. Cette propriété peut s'étendre dans le cas plus général des équations de Poisson. De plus, il est possible

de montrer en utilisant une démonstration analogue qu'ajouter un autre type de terme source singulier équivaut à une autre condition de saut :

$$\boldsymbol{\Delta}\varphi = b(\vec{x}_\Gamma)\delta_\Gamma \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} \boldsymbol{\Delta}\varphi = 0 \\ \\ [\vec{n}_1 \,.\, \nabla\varphi] = b(\vec{x}_\Gamma) \end{cases} \tag{2.52}$$

Les deux propriétés (2.51) et (2.52) peuvent être étendues aux équations de Poisson et seront utilisées pour montrer l'équivalence des méthodes Ghost Fluid Primitive, conservative et semi-conservative.

### 2.3.2 Méthode Continuous Surface Force (CSF)

Dans un écoulement diphasique, la viscosité dynamique et la masse volumique varient en fonction du fluide. Elles peuvent être définies en utilisant la fonction de Heaviside $H_\Gamma$, égale à un dans le liquide et à zéro dans le gaz :

$$\rho = \rho_g + (\rho_l - \rho_g)H_\Gamma \tag{2.53}$$

$$\mu = \mu_g + (\mu_l - \mu_g)H_\Gamma \tag{2.54}$$

De plus, une force supplémentaire s'ajoute aux équations de Navier-Stokes : la force liée à la tension de surface qui ne s'applique qu'à l'interface entre deux fluides. Le bilan de quantité de mouvement s'écrit donc :

$$\int_\Omega \rho \frac{\mathcal{D}\vec{V}}{\mathcal{D}t} d\Omega = \int_\Omega \left( -\nabla P + \nabla.(2\mu\bar{\bar{D}}) + \rho g \right) d\Omega + \int_\Gamma \sigma\kappa\vec{n} dS$$

Où $\Gamma$ est la surface qui sépare le liquide du gaz (*i. e.* l'interface), $\vec{n}$ est la normale extérieure au liquide (2.55), $\kappa$ représente la courbure (2.56) et $\sigma$ la tension superficielle. La normale et la courbure peuvent s'écrire en fonction de $\phi$ :

$$\vec{n} = \frac{\nabla\phi}{||\nabla\phi||} \tag{2.55}$$

$$\kappa = -\nabla.\vec{n} \tag{2.56}$$

La force capillaire ne s'applique qu'à l'interface entre deux fluides. Une approche globale consiste à montrer que l'intégrale surfacique peut s'écrire sous forme d'intégrale volumique afin d'obtenir une loi locale :

$$\int_\Gamma \sigma\kappa\vec{n} dS = \int_\Omega \sigma\kappa\nabla\phi \; \delta(\phi) d\Omega \tag{2.57}$$

En utilisant (2.57) la loi locale s'écrit :

$$\rho \frac{\mathcal{D}\vec{V}}{\mathcal{D}t} = -\nabla P + \nabla.(2\mu D) + \rho g + \sigma\kappa\nabla\phi \; \delta(\phi) \tag{2.58}$$

La méthode Continuous Surface Force (CSF) consiste à définir des fonctions de Heaviside $H_\varepsilon$ et de Dirac $\delta_\varepsilon$ continues à l'interface pour lisser le changement abrupte des variables discontinues telles que $\mu$ et $\rho$. La formulation de type « Whole Domain Formulation » de l'équation de Navier-Stokes et l'équation de continuité s'écrivent donc :

$$\rho\left(\frac{\partial\vec{V}}{\partial t}+(\vec{V}.\nabla)\vec{V}\right)=-\nabla P+\boxed{\nabla.(2\mu\bar{\bar{D}})}+\rho\vec{g}+\sigma\kappa\delta_\Gamma\vec{n}$$
$$\nabla.\vec{V}=0$$

Comme dans le cas monophasique, la méthode de projection est utilisée pour résoudre ce système d'équations avec, bien sûr, les modifications nécessaires. La vitesse intermédiaire $\vec{V}^*$ pour ce type de problème s'écrit donc :

$$\vec{V}_1^*=\vec{V}^n-\Delta t\left((\vec{V}^n.\nabla)\vec{V}^n-\frac{\nabla.\left(2\mu\bar{\bar{D}}\right)}{\rho^{n+1}}-\frac{\sigma\kappa\vec{n}\delta_\varepsilon}{\rho^{n+1}}-\vec{g}\right) \tag{2.59}$$

La pression peut être à présent calculée à partir de la vitesse intermédiaire en résolvant l'équation de Poisson suivante :

$$\nabla.\left(\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right)=\frac{\nabla.\vec{V}_1^*}{\Delta t} \tag{2.60}$$

Enfin, la vitesse au temps $t^{n+1}$ s'écrit :

$$\vec{V}^{n+1}=\vec{V}_1^*-\Delta t\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}} \tag{2.61}$$

L'inconvénient de cette méthode réside dans l'idée même de lisser un domaine qui est par définition singulier. De plus, elle est soumise au développement de courants parasites pour des nombres capillaires importants, ce qui peut entrainer de fortes instabilités numériques. C'est pourquoi d'autres types de méthodes ont été implémentées en considérant les termes de viscosité et de tension de surface comme des conditions de saut à l'interface. L'approche adoptée et décrite ci-après permet à l'interface de conserver son caractère d'espace de dimension $n-1$ dans un domaine de dimension $n$.

### 2.3.3 Méthode « Ghost Fluid Primitive Viscous Method »

La méthode « Ghost Fluid Primitive Viscous Method »(GFPVM) a été développée par *Kang et al.* dans [55]. Les auteurs utilisent la méthode de projection pour résoudre les équations de Navier-Stokes et de continuité avec une interpétation différente du terme visqueux. En effet, ce terme peut s'écrire :

$$\nabla.\left(2\mu\bar{\bar{D}}\right)=\mu\nabla.\left(2\bar{\bar{D}}\right)+2\bar{\bar{D}}.\nabla\mu \tag{2.62}$$

Si la viscosité est constante par morceaux (et c'est le cas ici), en utilisant la définition de la dérivée

de la fonction de Heaviside à savoir la fonction de dirac $\delta_\Gamma$ il est possible de montrer que :

$$\nabla\mu = [\mu]_\Gamma \vec{n}\delta_\Gamma \tag{2.63}$$

$$\Rightarrow \quad \nabla.\left(2\mu\bar{\bar{D}}\right) = \mu\boldsymbol{\Delta}\vec{V} + 2[\mu]_\Gamma\ \bar{\bar{D}}\ .\ \vec{n}\ \delta_\Gamma \tag{2.64}$$

Comme le tenseur $\bar{\bar{D}}$ est fonction à la fois du gradient de la vitesse et de sa transposée, une écriture plus simple est préférable en utilisant la propiété suivante :

$$\vec{n}^t\ .\ \bar{\bar{D}}\ .\ \vec{n} \quad = \quad \vec{n}^t\ .\ \nabla\left(\vec{V}\ .\ \vec{n}\right) = \frac{\partial V_n}{\partial n} \tag{2.65}$$

La vitesse intermédiare est donc définie de façon identique à celle calculée dans le cas monophasique :

$$\vec{V}_2^* = \vec{V}^n - \Delta t\left((\vec{V}^n\ .\ \nabla)\vec{V}^n - \frac{\rho}{\mu}\boldsymbol{\Delta}\vec{V}^n - \vec{g}\right) \tag{2.66}$$

Comme dans le cas diphasique la viscosité n'est pas continue à l'interface, il faut impérativement prendre en compte l'effet de cette discontinuité « ignorée » dans le calcul de la vitesse intermédiare. Pour cela, les efforts visqueux à l'interface sont traités comme une condition de saut qui s'ajoute à celle dûe aux forces capillaires :

$$\nabla.\left(\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right) \quad = \quad \frac{\nabla\ .\ \vec{V}_2^*}{\Delta t} + \nabla.\left(\frac{\left(\sigma\kappa + 2[\mu]_\Gamma\frac{\partial V_n}{\partial n}\right)\vec{n}\delta_\Gamma}{\rho^{n+1}}\right) \tag{2.67}$$

Ce qui d'après (2.59) et (2.64) est équivalent à :

$$\nabla.\left(\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right) \quad = \quad \frac{\nabla\ .\ \vec{V}_1^*}{\Delta t} \tag{2.68}$$

L'équation 2.67 est équivalente au problème suivant, d'après la propriété démontrée dans la partie 2.3.1 qui permet de prendre en compte un terme source singulier comme une condition de saut à l'interface :

$$\begin{cases} \nabla.\left(\dfrac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right) = \dfrac{\nabla\ .\ \vec{V}_2^*}{\Delta t} \\ \\ [P]_\Gamma = \sigma\kappa + 2[\mu]_\Gamma\dfrac{\partial V_n}{\partial n} \end{cases} \tag{2.69}$$

La vitesse $\vec{V}^{n+1}$, respectant la condition d'incompressibilité, s'écrit donc en fonction de $P$ et $\vec{V}_2^*$ et possède un terme source singulier lié aux discontinuités à l'interface. Ce terme sera également traité comme une condition de saut sur $P$.

$$\vec{V}^{n+1} = \vec{V}_2^* - \frac{\Delta t}{\rho^{n+1}}\left(\nabla P^{n+1} - \left(\sigma\kappa + 2[\mu]_\Gamma\frac{\partial V_n}{\partial n}\right)\vec{n}\delta_\Gamma\right) \tag{2.70}$$

Le terme de viscosité de la formulation « Ghost-Fluid Primitive Viscous Method » peut être traité de manière implicite puisque, contrairement à la méthode « Ghost-Fluid Conservative Viscous Method », chaque équation sur les composantes de la vitesse est indépendante des autres. Nous verrons par la suite dans la partie traitant de la discrétisation spatiale de cette méthode, qu'elle n'est cependant pas adaptée aux changements de phase.

### 2.3.4 Méthode « Ghost Fluid Conservative Viscous Method »

Dans la méthode développée par *Sussman et al.* [95], le terme capillaire est considéré comme une condition de saut de pression à l'interface. Cette méthode sera appelée « Ghost Fluid Conservative Viscous Method »(GFCVM) dans cette thèse. La méthode de projection est également utilisée pour résoudre les équations de Navier -Stokes, mais une autre vitesse intermédiaire $\vec{V}_3^*$ est calculée sans le terme lié à la tension de surface :

$$\begin{aligned} \vec{V}_3^* &= \vec{V}^n - \Delta t \left( (\vec{V}^n \,.\, \nabla)\vec{V}^n - \frac{\nabla.(2\mu\bar{\bar{D}})}{\rho^{n+1}} - \vec{g} \right) \\ &= \vec{V}_1^* - \frac{\Delta t\ \sigma\ \kappa}{\rho}\ \vec{n}\delta_\Gamma \end{aligned} \tag{2.71}$$

Où $\vec{V}_1^*$ est la vitesse intermédiaire de la méthode CSF définie dans (2.59). La pression est solution d'une équation qui tient compte du terme capillaire :

$$\nabla.\left(\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right) = \frac{\nabla \,.\, \vec{V}_3^*}{\Delta t} + \nabla.\left(\frac{\sigma\kappa\vec{n}\delta_\Gamma}{\rho^{n+1}}\right) \tag{2.72}$$

Cette équation est équivalente à :

$$\nabla.\left(\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right) = \frac{\nabla \,.\, \vec{V}_1^*}{\Delta t} \tag{2.73}$$

Et la vitesse au temps $t^{n+1}$ s'écrit en fonction de cette nouvelle vitesse intermédiaire et de la pression dynamique qui en résulte :

$$\begin{aligned} \vec{V}^{n+1} &= \vec{V}_3^* - \frac{\Delta t}{\rho^{n+1}}\left(\nabla P^{n+1} - \sigma\kappa\vec{n}\delta_\Gamma\right) \\ \Leftrightarrow \vec{V}^{n+1} &= \vec{V}_1^* - \frac{\Delta t}{\rho^{n+1}}\nabla P^{n+1} \end{aligned} \tag{2.74}$$

Cette méthode peut être adaptée pour prendre en compte une eventuelle discontinuité des vitesses due au changement de phase. Elle est malheureusement peu adaptée pour traiter le terme liée à la viscosité de manière implicite. En effet, le terme visqueux suivant la direction $\vec{e}_x$ fait intervenir la vitesse suivant $\vec{e}_y$( et éventuellement $\vec{e}_z$ en 3D) ce qui empêche de traiter l'équation sur $\vec{V}_1^*$ composante par composante ce qui complexifie énormément le problème.

### 2.3.5 Méthode « Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous Method »

La méthode « Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous Method » (GFSCVM) a été créée pour les besoins de cette étude et a été décrite dans un article récemment soumis [59]. Cette méthode permet de prendre en compte le terme visqueux de façon implicite lorsqu'il y a des changements de phase et que les vitesses sont discontinues à l'interface. Le terme visqueux est formulé de la façon suivante :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \left(2\mu\bar{\bar{D}}\right) &= \nabla \cdot \left(\mu\nabla\vec{V}\right) + \nabla \cdot \left(\mu\nabla^t\vec{V}\right) \\ &= \nabla \cdot \left(\mu\nabla\vec{V}\right) + \nabla^t\vec{V} \cdot \nabla\mu + \cancelto{0}{\mu\nabla \cdot \left(\nabla^t\vec{V}\right)} \\ &= \nabla \cdot \left(\mu\nabla\vec{V}\right) + [\mu]_\Gamma \, \nabla^t\vec{V} \cdot \vec{n} \, \delta_\Gamma \end{aligned} \tag{2.75}$$

Si la vitesse intermédiaire est définie de la façon suivante :

$$\vec{V}_4^* = \vec{V}^n - \Delta t \left( (\vec{V}^n \cdot \nabla)\vec{V}^n - \frac{\nabla.(\mu\nabla\vec{V}^n)}{\rho^{n+1}} - \vec{g} \right) \tag{2.76}$$

Alors l'équation de Poisson équivalente à (2.60), (2.67) et (2.72) s'écrit :

$$\nabla.\left(\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right) = \frac{\nabla\vec{V}_4^*}{\Delta t} + \nabla.\left(\frac{\left(\sigma\kappa + [\mu]_\Gamma \frac{\partial V_n}{\partial n}\right)\vec{n}\delta_\Gamma}{\rho^{n+1}}\right) \tag{2.77}$$

Finalement, la vitesse au temps $t^{n+1}$ s'écrit :

$$\vec{V}^{n+1} = \vec{V}_4^* - \frac{\Delta t}{\rho^{n+1}} \left( \nabla P^{n+1} - \left(\sigma\kappa + [\mu]_\Gamma \frac{\partial V_n}{\partial n}\right)\vec{n}\delta_\Gamma \right) \tag{2.78}$$

La simulation de l'effet Leidenfrost nécessite de prendre en compte les changements de phase et de traiter le terme visqueux de manière implicite car la condition de CFL liée à ce terme est beaucoup trop restrictive pour des maillages très raffinés (*Cf.* partie 2.2.3). C'est pourquoi la méthode « Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous Method » sera utilisée dans le code $\mathcal{DIVA}$ avec un traitement implicite du terme visqueux en présence de changement de phase. La méthode implémentée est détaillé dans la partie 3.5.1.

## 2.4 Discrétisation spatiale des méthodes numériques pour le terme visqueux

Dans un souci de lisibilité, seule la discrétisation temporelle des méthodes permettant de prendre en compte le terme lié à la viscosité, a été détaillée dans la partie précédente. Ce paragraphe a donc pour but d'exposer la discrétisation spatiale des équations pour chacune des approches « Continuous Surface Force », « Ghost Fluid Primitive Viscous method », « Ghost Fluid Conservative Viscous Method »et « Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous method ».

### 2.4.1 Discrétisation spatiale de la méthode CSF

Les fonctions de Heaviside et de Dirac $H_\varepsilon$ et $\delta_\varepsilon$ permettant de lisser les variables discontinues ont été définies par *Sussman et al.* [94] et s'écrivent :

$$H_\varepsilon(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad \phi(\vec{x}) < -\varepsilon \\ \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\phi(\vec{x})}{\varepsilon} + \frac{sin(\pi\phi(\vec{x})/\varepsilon)}{\pi}\right) & \text{si} \quad |\phi(\vec{x})| \leqslant \varepsilon \\ 1 & \text{si} \quad \phi(\vec{x}) > \varepsilon \end{cases} \tag{2.79}$$

$$\delta_\varepsilon(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad |\phi(\vec{x})| > \varepsilon \\ \frac{1}{2\varepsilon}\left(1 + cos\left(\frac{\pi\phi(\vec{x})}{\varepsilon}\right)\right) & \text{sinon} \end{cases} \tag{2.80}$$

L'interface est généralement lissée sur une ou deux mailles et $\varepsilon$ désigne la largeur de ce lissage. Les équations vont être résolues à partir de la définition de ces deux nouvelles fonctions. Soit $A$ une variable constante par morceaux et discontinue à travers l'interface entre deux domaines $\Omega_1$ et $\Omega_2$, et $\phi$ la fonction Level Set positive dans $\Omega_2$, négative dans $\Omega_1$ et nulle à l'interface, alors $A$ s'écrit de la manière suivante :

$$A(\vec{x}) = A_1 + (A_2 - A_1)\, H_\varepsilon(\vec{x}) \tag{2.81}$$

**Discrétisation de $\vec{V}_1^*$ :**

La discrétisation de l'équation (2.59) s'effectue de la même manière que dans le cas monophasique avec une méthode de type Volume Fini, dans un maillage MAC :

$$\begin{aligned}(\mathcal{V}\rho^{n+1}u_1^*)_{i+\frac{1}{2},j} &= (\mathcal{V}\rho^{n+1}u^n)_{i+\frac{1}{2},j} \\ -\Delta t \int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} &\left( \rho^{n+1} \underbrace{(\vec{V}^n.\nabla)u^n\Big|^x}_{A_u} - \underbrace{\nabla.\left(2\mu\bar{\bar{D}}\right)\Big|^x}_{B_u} + \underbrace{\sigma\kappa\vec{n}\delta_\varepsilon|^x}_{C_u} - \rho^{n+1}g^x \right) d\Omega \end{aligned} \tag{2.82}$$

$$\begin{aligned}(\mathcal{V}\rho^{n+1}v_1^*)_{i,j+\frac{1}{2}} &= (\mathcal{V}\rho^{n+1}v^n)_{i,j+\frac{1}{2}} \\ -\Delta t \int_{\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} &\left( \rho^{n+1} \underbrace{(\vec{V}^n.\nabla)v^n\Big|^y}_{A_v} - \underbrace{\nabla.\left(2\mu\bar{\bar{D}}\right)\Big|^y}_{B_v} + \underbrace{\sigma\kappa\vec{n}\delta_\varepsilon|^y}_{C_v} - \rho^{n+1}g^y \right) d\Omega \end{aligned} \tag{2.83}$$

Les termes $A_u$ et $A_v$ sont discrétisés avec un schéma de type WENO5 et les termes $C_u$ et $C_v$ en

utilisant la fonction de Dirac $\delta_\varepsilon$ lissées définie dans (2.80) ce qui, en 2D, s'écrit :

$$C_u = \sigma\ \kappa_{i+\frac{1}{2},j}\ n^x_{i+\frac{1}{2},j}\ \delta_\varepsilon(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j) \qquad C_v = \sigma\ \kappa_{i,j+\frac{1}{2}}\ n^y_{i,j+\frac{1}{2}}\ \delta_\varepsilon(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}) \tag{2.84}$$

Le théorème de la divergence est appliqué à l'intégrale volumique des termes $B_u$ et $B_v$ :

$$\int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} B_u d\Omega = \int_{\partial\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} 2\mu\bar{\bar{D}}_x\ \vec{n}\ dS = \int_{\partial\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} \mu \begin{pmatrix} 2\dfrac{\partial u}{\partial x} \\ \\ \dfrac{\partial v}{\partial x} + \dfrac{\partial u}{\partial y} \end{pmatrix} \vec{n}\ dS$$

$$\int_{\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} B_v d\Omega = \int_{\partial\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} 2\mu\bar{\bar{D}}_y\ \vec{n}\ dS = \int_{\partial\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} \mu \begin{pmatrix} \dfrac{\partial v}{\partial x} + \dfrac{\partial u}{\partial y} \\ \\ 2\dfrac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} \vec{n}\ dS$$

Ce qui aboutit finalement à la discrétisation suivante :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} B_u\ d\Omega \ \approx\ & -\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} \Delta x_i + \left(2\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1,j} \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \\ & + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x_i - \left(2\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{2.85}$$

$$\left(2\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1,j} = 2\mu_{i+1,j}\left(\frac{u_{i+\frac{3}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}}\right) \tag{2.86}$$

$$\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta y_j}\right) \tag{2.87}$$

$$\left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\left(\frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i}\right) \tag{2.88}$$

La même méthode de discrétisation est appliquée à la composante $B_v$ :

$$\int_{\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} B_v \, d\Omega \approx -\left(2\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right)_{i,j}\Delta x_{i-\frac{1}{2}} + \left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}+\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\Delta y_j \tag{2.89}$$

$$+\left(2\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right)_{i,j+1}\Delta x_{i-\frac{1}{2}} - \left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}+\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\Delta y_j \tag{2.90}$$

$$\left(2\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right)_{i,j+1} = 2\mu_{i,j+1}\left(\frac{v_{i,j+\frac{3}{2}}-v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta y_{j+\frac{1}{2}}}\right) \tag{2.91}$$

$$\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1}-u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta y_j}\right) \tag{2.92}$$

$$\left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\left(\frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}}-v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i}\right) \tag{2.93}$$

La méthode CSF préconise le lissage des valeurs à l'interface en remplaçant $H_\Gamma$ par $H_\varepsilon$ (définie dans (2.79)) dans les équations (2.53) et (2.54).

**Discrétisation de l'équation de Poisson sur la pression :**

La discrétisation de l'équation de Poisson sur la pression (2.60) est effectuée de manière analogue au cas monophasique en prenant en compte le fait que la masse volumique $\rho$ est discontinue à l'interface :

$$\int_{\partial\Omega_{i,j}}\left(\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right)\vec{n}\,dS \approx -\left(\frac{P^{n+1}_{i,j}-P^{n+1}_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1}}\right)\frac{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}}{\rho^{n+1}_{i,j-\frac{1}{2}}} + \left(\frac{P^{n+1}_{i+1,j}-P^{n+1}_{i,j}}{\Delta x_i}\right)\frac{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}}{\rho^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j}}$$
$$+\left(\frac{P^{n+1}_{i,j+1}-P^{n+1}_{i,j}}{\Delta y_j}\right)\frac{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}}{\rho^{n+1}_{i,j+\frac{1}{2}}} - \left(\frac{P^{n+1}_{i,j}-P^{n+1}_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1}}\right)\frac{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}}{\rho_{i-\frac{1}{2},j}}$$

Ce qui conduit à la resolution d'un système linéaire $AP = F$ avec les mêmes caractéristiques que dans le cas monophasique :

$$P_l = P^n_{i,j}$$

$$F_l = \frac{\mathcal{V}_{i,j}}{\Delta t}\left(\frac{u^*_{i+\frac{1}{2},j}-u^*_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}}+\frac{v^*_{i,j+\frac{1}{2}}-v^*_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}}\right)$$

$$\mathcal{A}^+_l = \frac{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x_i\ \rho^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j}} \qquad \mathcal{A}^-_l = \frac{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i-1}\ \rho^{n+1}_{i-\frac{1}{2},j}} \qquad \mathcal{B}^+_l = \frac{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta y_j\ \rho^{n+1}_{i,j+\frac{1}{2}}} \qquad \mathcal{B}^-_l = \frac{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta y_{j-1}\ \rho^{n+1}_{i,j-\frac{1}{2}}}$$

$$\mathcal{A}^m_l = -\left(\mathcal{A}^+_l + \mathcal{A}^-_l + \mathcal{B}^+_l + \mathcal{B}^-_l\right)$$

Où l'indice $l = i + (j-1)N_x$ repère chacun des points de discrétisation. Cet indice dépend de $N_x$, le nombre de points de discrétisation dans la direction $\vec{e}_x$ pour des indices $j$ et $k$ donnés. Les entiers

$N_y$ et $N_z$ représentent les nombres de points de discrétisation dans les directions $\vec{e}_y$ et $\vec{e}_z$ pour des indices $(i,k)$ et $(i,j)$ donnés.

**Calcul de $\vec{V}^{n+1}$ :**

Enfin, le calcul de la vitesse au temps $t^{n+1}$ s'écrit :

$$\begin{cases} u^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j} &= u^{*}_{i+\frac{1}{2}} - \dfrac{\Delta t}{\rho^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j}} \left( \dfrac{P^{n+1}_{i+1,j} - P^{n+1}_{i}}{\Delta x_i} \right) \\ \\ v^{n+1}_{i,j+\frac{1}{2}} &= v^{*}_{i,j+\frac{1}{2}} - \dfrac{\Delta t}{\rho^{n+1}_{i,j+\frac{1}{2}}} \left( \dfrac{P^{n+1}_{i,j+1} - P^{n+1}_{i,j}}{\Delta y_j} \right) \end{cases} \tag{2.94}$$

### 2.4.2 Discrétisation spatiale de la méthode GFCVM

La discrétisation spatiale de l'équation de la vitesse intermédiaire $V_1^* = (u^{*_1}, v^{*_1})$ est également effectuée dans un maillage décalé avec une méthode de type « Volumes Finis »Ce qui donne une équation similaire à celle sur $\vec{V}_1^*$ sans le terme de capillarité :

$$\left(\rho^{n+1} u_3^* \mathcal{V}\right)_{i+\frac{1}{2},j} = \left(\rho^{n+1} u^n \mathcal{V}\right)_{i+\frac{1}{2},j} - \Delta t \int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} \left( \rho^{n+1} \underbrace{\vec{V}^n.\nabla) u^n}_{A_u} - \underbrace{\nabla.\left(2\mu \bar{\bar{D}}\right)\Big|^x}_{B_u} - \rho^{n+1}\, g^x \right) d\Omega$$

$$\left(\rho^{n+1} v_3^* \mathcal{V}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} = \left(\rho^{n+1} v^n \mathcal{V}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} - \Delta t \int_{\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} \left( \rho^{n+1} \underbrace{\vec{V}^n.\nabla) v^n}_{A_v} - \underbrace{\nabla.\left(2\mu \bar{\bar{D}}\right)\Big|^y}_{B_v} - \rho^{n+1}\, g^y \right) d\Omega$$

La discrétisation des termes $A_u, A_v, B_u$ et $B_v$ est la même que dans la méthode CSF loin de l'interface. Par contre, la méthode Ghost Fluid (*Cf* partie 2.5) est utilisée au voisinage de l'interface pour prendre en compte les discontinuités. Elle permet de traiter ces discontinuités à l'interface comme des termes source supplémentaires sans modifier la matrice de discrétisation.

L'équation de Poisson (2.72) contient un terme source singulier lié aux forces capillaires. Il a été démontré dans la partie 2.3.1 que résoudre l'équation de Poisson avec un tel terme equivaut à résoudre le problème analogue suivant :

$$\begin{cases} \nabla.\left(\dfrac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right) = \dfrac{\nabla\,.\,\vec{V}_3^*}{\Delta t} \\ \\ [P]_\Gamma = \sigma\kappa \end{cases} \tag{2.95}$$

La discrétisation d'un tel problème avec la méthode Ghost-Fluid pour la résolution d'une équation de Poisson avec une conditions de saut est détaillé dans la partie 2.5.2. Finalement, la discrétisation de

la vitesse au temps $t^{n+1}$ s'écrit :

$$\begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} &= u_{i+\frac{1}{2}}^{*3} - \dfrac{\Delta t}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}} \left( \dfrac{P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta x_i} \right) + F_{i+\frac{1}{2},j}^{x} \\ \\ v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= v_{i,j+\frac{1}{2}}^{*3} - \dfrac{\Delta t}{\rho_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}} \left( \dfrac{P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta y_j} \right) + F_{i,j+\frac{1}{2}}^{y} \end{cases} \tag{2.96}$$

Où les termes $F_{i+\frac{1}{2},j}^{x}$ et $F_{i,j+\frac{1}{2}}$ sont ajoutés au second membre pour rendre compte des discontinuités de la pression :

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{x} = \begin{cases} a_{i,j}\theta + a_{i+1,j}\left(1-\theta\right) & \text{Si } \phi_{i,j} < 0 \text{ et } \phi_{i+1,j} \geqslant 0 \\ \\ -\left(a_{i,j}\theta + a_{i+1,j}\left(1-\theta\right)\right) & \text{Si } \phi_{i,j} \geqslant 0 \text{ et } \phi_{i+1,j} < 0 \\ \\ 0 & \text{Sinon} \end{cases} \quad \text{Où} \quad \begin{cases} \theta = \dfrac{\phi_{i+1,j}}{\phi i,j + \phi i+1,j} \\ \\ a_{i,j} = \Delta t\ \sigma\ \kappa_{i,j} \end{cases}$$

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{y} = \begin{cases} a_{i,j}\theta + a_{i,j+1}\left(1-\theta\right) & \text{Si } \phi_{i,j} < 0 \text{ et } \phi_{i,j+1} \geqslant 0 \\ \\ -\left(a_{i,j}\theta + a_{i,j+1}\left(1-\theta\right)\right) & \text{Si } \phi_{i,j} \geqslant 0 \text{ et } \phi_{i,j+1} < 0 \\ \\ 0 & \text{Sinon} \end{cases} \quad \text{Où} \quad \begin{cases} \theta = \dfrac{\phi_{i,j+1}}{\phi i,j + \phi i,j+1} \\ \\ a_{i,j} = \Delta t\ \sigma\ \kappa_{i,j} \end{cases}$$

La masse volumique est discontinue à l'interface, elle est donc interpolée à l'intérieur de la maille afin que la discrétisation soit précise. L'inverse de la masse volumique peut donc s'écrire en fonction des coefficients $\alpha_{i+\frac{1}{2},j}$ et $\alpha_{i,j+\frac{1}{2}}$ qui sont définis dans (2.134) et (2.135) respectivement :

$$\frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}} = \alpha_{i+\frac{1}{2},j} \tag{2.97}$$

$$\frac{1}{\rho_{i,j+\frac{1}{2}}} = \alpha_{i,j+\frac{1}{2}} \tag{2.98}$$

### 2.4.3 Discrétisation spatiale de la méthode GFPVM

Lorsque l'on utilise la méthode GFPVM issue des travaux de *Kang et al.* [55], le calcul des termes visqueux diffère de celui proposé dans *Sussman et al.* [95] pour la méthode GFCVM. La projection du

terme de viscosité sur les directions $\vec{e}_x$ et $\vec{e}_y$ s'écrit :

$$\begin{cases} \mu \, \boldsymbol{\Delta}\vec{V}\Big|^{x}_{i+\frac{1}{2},j} = \mu \left( \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} \right) \\ \\ \mu \, \boldsymbol{\Delta}\vec{V}\Big|^{y}_{i,j+\frac{1}{2}} = \mu \left( \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + \dfrac{\partial^2 v}{\partial y^2}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} \right) \end{cases} \tag{2.99}$$

Les opérateurs de discrétisation des dérivées secondes peuvent s'écrire en fonction des opérateurs utilisés dans la partie 2.3.2 :

$$\begin{cases} \mu \, \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(\mu \dfrac{\partial u}{\partial x}\right)\Big|_{i+\frac{1}{2},j} - \left[\mu \dfrac{\partial u}{\partial x}\right]_{\Gamma} \delta_{\Gamma}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} \\ \\ \mu \, \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \dfrac{\partial}{\partial y}\left(\mu \dfrac{\partial u}{\partial y}\right)\Big|_{i+\frac{1}{2},j} - \left[\mu \dfrac{\partial u}{\partial y}\right]_{\Gamma} \delta_{\Gamma}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} \\ \\ \mu \, \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(\mu \dfrac{\partial v}{\partial x}\right)\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} - \left[\mu \dfrac{\partial v}{\partial x}\right]_{\Gamma} \delta_{\Gamma}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} \\ \\ \mu \, \dfrac{\partial^2 v}{\partial y^2}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \dfrac{\partial}{\partial y}\left(\mu \dfrac{\partial v}{\partial y}\right)\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} - \left[\mu \dfrac{\partial v}{\partial y}\right]_{\Gamma} \delta_{\Gamma}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} \end{cases} \tag{2.100}$$

Cette étape permet de reformuler les termes afin d'utiliser la méthode des volumes finis. Utiliser des termes source singuliers correspond à résoudre un problème équivalent (*Cf* partie 2.3.1) avec une condition de saut qui est donnée dans [55] :

$$\begin{cases} \mu \, \boldsymbol{\Delta}\vec{V}\Big|^{x} = \nabla.\left(\mu \nabla u\right) \\ \\ \mu \, \boldsymbol{\Delta}\vec{V}\Big|^{y} = \nabla.\left(\mu \nabla v\right) \end{cases} \tag{2.101}$$

$$\begin{pmatrix} \left[\mu \dfrac{\partial u}{\partial x}\right]_{\Gamma} & \left[\mu \dfrac{\partial u}{\partial y}\right]_{\Gamma} \\ \\ \left[\mu \dfrac{\partial v}{\partial x}\right]_{\Gamma} & \left[\mu \dfrac{\partial v}{\partial y}\right]_{\Gamma} \end{pmatrix} = [\mu]_{\Gamma} \left( \nabla\vec{V} \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \vec{t} \end{pmatrix}^{t} \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \vec{t} \end{pmatrix} + \vec{n}^{t} \, \vec{n} \, \nabla\vec{V}\vec{n}^{t} \, \vec{n} \; - \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \vec{t} \end{pmatrix}^{t} \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \vec{t} \end{pmatrix} \nabla\vec{V}\vec{n}^{t}\vec{n} \right) \tag{2.102}$$

Les détails de la discrétisation spatiale de ce problème sont donnés par *Kang et al.* dans [55].

Notons que la condition de saut sur le flux visqueux utilisée par *Kang et al.* n'est valable que si les

vitesses sont continues à l'interface ce qui n'est pas le cas lorsqu'il y a des changements de phase.

### 2.4.4 Discrétisation spatiale de la méthode GFSCVM

**Discrétisation explicite :**

L'équation (2.76) est discrétisée avec une méthode de volumes finis. Pour appliquer cette méthode, l'équation est multipliée par $\rho^{n+1}$ ce qui, en 2D, donne deux équations sur les composantes de la vitesse intermédiaire $u_4^*$ et $v_4^*$ qui seront intégrés sur les domaines $\Omega_{i+\frac{1}{2},j}$ et $\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}$ respectivement :

$$\int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} \rho^{n+1} u_4^* \, d\Omega = \int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} \left( \rho^{n+1} \, u^n d\Omega - \Delta t \left( \rho^{n+1} \, (\vec{V}^n \, . \, \nabla) u^n - \nabla.(\mu \nabla u^n) - \rho^{n+1} g_x \right) \right) d\Omega$$

$$\int_{\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} \rho^{n+1} v_4^* \, d\Omega = \int_{\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} \left( \rho^{n+1} \, v^n d\Omega - \Delta t \left( \rho^{n+1} \, (\vec{V}^n \, . \, \nabla) v^n - \nabla.(\mu \nabla v^n) - \rho^{n+1} g_y \right) \right) d\Omega$$

La discrétisation de la plupart des termes a déjà été décrite plus haut, le terme convectif est discrétisé avec la méthode WENO5, et le théorème de la divergence est appliqué au terme visqueux :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} \nabla.(\mu \nabla u^n) d\Omega &= \int_{\partial\Omega_{i+\frac{1}{2},j}} \mu \nabla u^n . \vec{n} dS \\ \int_{\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} \nabla.(\mu \nabla v^n) d\Omega &= \int_{\partial\Omega_{i,j+\frac{1}{2}}} \mu \nabla v^n . \vec{n} dS \end{aligned}$$

La discrétisation de ces termes a déjà été faite antérieurement. Cette méthode est adaptée au changement de phase en rajoutant la condition de saut sur $\vec{V}_4^*$ (*Cf.* partie 3.5.1). L'équation de Poisson sur $P$ est calculée avec la méthode Ghost-Fluid en utilisant le problème equivalent suivant :

$$\begin{cases} \nabla. \left( \dfrac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}} \right) = \dfrac{\nabla.\vec{V}_4^*}{\Delta t} \\ \\ [P]_\Gamma = \sigma\kappa + [\mu]_\Gamma \dfrac{\partial V_n}{\partial n} \end{cases} \tag{2.103}$$

Dans le cas des changement de phase, la vitesse n'étant pas continue à l'interface, le saut de pression s'écrira :

$$[P]_\Gamma = \sigma\kappa + \left[ \mu \, \frac{\partial V_n}{\partial n} \right]_\Gamma \tag{2.104}$$

La partie suivante est consacrée à la résolution des équations de Poisson avec une condition de saut à l'interface avec la méthode dite « Ghost Fluid ».

## 2.5 La méthode Ghost Fluid pour le traitement des conditions de saut

La méthode Ghost Fluid a été développée par *Liu et al.* [62, 25] pour résoudre les équations de Poisson à coefficients non constants. Le système à résoudre est une équation de poisson avec une condition de saut de la variable et de son gradient à l'interface :

$$S = \begin{cases} \nabla.(\alpha \nabla P) &= f(\vec{x}) \\ [P]_\Gamma &= a(\vec{x}) \\ [\alpha \nabla P.\vec{n}]_\Gamma &= b(\vec{x}) \end{cases} \tag{2.105}$$

La discrétisation de ce problème est d'abord effectée en une dimension afin de bien en comprendre le principe.

### 2.5.1 Méthode Ghost Fluid 1D

La méthode est détaillée dans le cas 1D afin d'en simplifier l'exposition, l'extension en 2D et 3D est donnée par la suite. Le système unidimensionnel s'écrit :

$$S_{1D} = \begin{cases} \dfrac{d}{dx}\left(\alpha \dfrac{dP}{dx}\right) &= f(x) \\ [P]_\Gamma &= a(x) \\ \left[\alpha \dfrac{dP}{dx}\right]_\Gamma &= b(x) \end{cases} \tag{2.106}$$

Une méthode de type « Volumes Finis » est utilisé pour discrétiser l'équation de Poisson, l'intégration de cette équation sur une maille $\Omega_i$ donne :

$$\int_{\Omega_i} \frac{d}{dx}\left(\alpha \frac{dP}{dx}\right) dV = \left[\alpha \frac{dP}{dx}\right]_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \tag{2.107}$$

Loin de l'interface, la discrétisation centrée de l'équation de Poisson unidimensionnelle sur une maille s'écrit :

$$\left[\alpha \frac{dP}{dx}\right]_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} = \alpha_{i+\frac{1}{2}} \left.\frac{dP}{dx}\right|_{i+\frac{1}{2}} - \alpha_{i-\frac{1}{2}} \left.\frac{dP}{dx}\right|_{i-\frac{1}{2}} \tag{2.108}$$

$$\approx \alpha_{i+\frac{1}{2}} \frac{P_{i+1} - P_i}{\Delta x_i} - \alpha_{i-\frac{1}{2}} \frac{P_i - P_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} \tag{2.109}$$

Plusieurs cas de figure étudiés par la suite sont à considérer lorsque la maille sur laquelle l'intégration des équations est faite est traversée par l'interface ou s'en approche.

### $1^{er}$ cas : La variable $P$ est discontinue à l'interface mais pas son gradient

Dans le cas où la variable est discontinue à l'interface et que celle-ci passe entre le point $x_i \in \Omega^-$ et $x_{i+1} \in \Omega^+$ la discrétisation du terme $\left.\frac{dP}{dx}\right|_{i+\frac{1}{2}}$ de l'équation (2.109) est moins précise (*cf* Fig. 2.5) puisqu'elle fait intervenir $P_{i+1}$ qui, du fait du saut de P à l'interface va fausser le calcul du gradient.

Pour éviter de cumuler des erreurs à l'interface, *Fedkiw et al.* proposent de créer une maille « fantôme »qui serait la continuité du domaine $\Omega^-$ et de calculer la valeur de $P$ dans cette maille, soit $P^-_{i+1}$. Une manière possible de calculer cette valeur est d'utiliser explicitement la valeur du saut à l'interface, à savoir $a_\Gamma$ :

$$a_\Gamma = P^+ - P^- \tag{2.110}$$

$$\Rightarrow P^-_{i+1} = P_{i+1} - a_\Gamma \tag{2.111}$$

Le terme $a_\Gamma$ est calculé à partir des valeurs des sauts entre deux points délimitant un segment traversé par l'interface :

$$a_\Gamma = \frac{a_i|\phi_{i+1}| + a_{i+1}|\phi_i|}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|} \tag{2.112}$$

Les valeurs $a_i$ et $a_{i+1}$ correspondent respectivement à $a(x_i)$ et $a(x_{i+1})$.

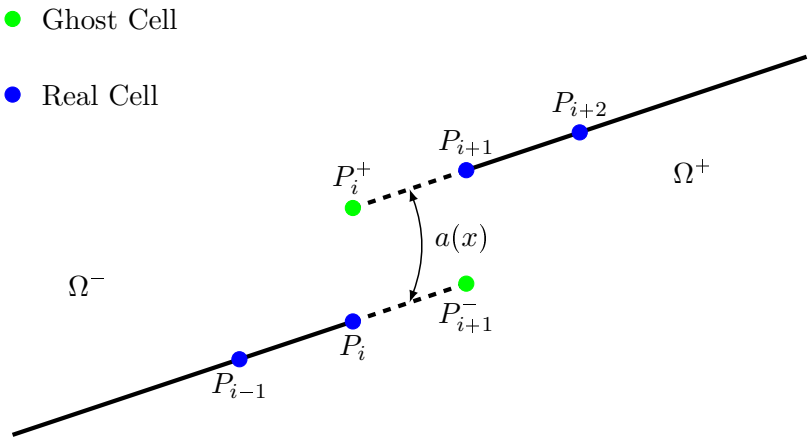



FIGURE 2.5 – Schématisation de la méthode Ghost Fluid

Considérer explicitement la valeur du saut implique de rajouter un terme au second membre du système linéaire $A\mathcal{P} = \mathcal{B}$ résultant où $A$ est la matrice de discrétisation tridiagonale en 2D, pentadiagonale

en 3D. La discrétisation devient :

$$\begin{aligned}\left[\alpha\frac{dP}{dx}\right]_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} &\approx \alpha_{i+\frac{1}{2}}\frac{P_{i+1}^{-}-P_i}{\Delta x_i}-\alpha_{i-\frac{1}{2}}\frac{P_i-P_{i-1}}{\Delta x_{i-1}}\\ &\approx \alpha_{i+\frac{1}{2}}\frac{P_{i+1}-P_i}{\Delta x_i}-\alpha_{i-\frac{1}{2}}\frac{P_i-P_{i-1}}{\Delta x_{i-1}}\underbrace{\boxed{-\alpha_{i+\frac{1}{2}}\frac{a_\Gamma}{\Delta x_i}}}_{2^{nd}membre}\end{aligned} \tag{2.113}$$

Les coefficients non nuls de cette matrice $A$ se trouvent sur $A^m$ la diagonale centrale, $A^{x-}$ la diagonale inférieure et $A^{x+}$ la diagonale supérieure :

$$\begin{aligned}A_i^{x-} &= \frac{\alpha_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i-1}}\\ A_i^{x+} &= \frac{\alpha_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i}\\ A_i^{m} &= -A_i^{x-}-A_i^{x+}\end{aligned}$$

Pour faire la discrétisation globale il faut donc considérer à chaque point, quatre cas de figure :

1. Si $x_i \in \Omega^-$
$$\begin{cases}\text{Si } x_{i+1}\in\Omega^+ & \alpha_{i+\frac{1}{2}}\dfrac{a_\Gamma}{\Delta x_i} \text{ est ajouté au } 2^{nd} \text{ membre}\\ \text{Si } x_{i-1}\in\Omega^+ & -\alpha_{i-\frac{1}{2}}\dfrac{a_\Gamma}{\Delta x_{i-1}} \text{ est ajouté au } 2^{nd} \text{ membre}\end{cases}$$

2. Si $x_i \in \Omega^+$
$$\begin{cases}\text{Si } x_{i+1}\in\Omega^- & -\alpha_{i+\frac{1}{2}}\dfrac{a_\Gamma}{\Delta x_i} \text{ est ajouté au } 2^{nd} \text{ membre}\\ \text{Si } x_{i-1}\in\Omega^- & \alpha_{i-\frac{1}{2}}\dfrac{a_\Gamma}{\Delta x_{i-1}} \text{ est ajouté au } 2^{nd} \text{ membre}\end{cases}$$

**$2^{\text{ème}}$ cas : Le gradient de la variable $P$ est discontinu à l'interface**

Il est nécessaire à présent de considérer le cas où le gradient de la variable est discontinu à travers l'interface. Si l'interface passe entre les points $x_i$ et $x_{i+1}$ et $x_i \in \Omega^-$, la discrétisation s'écrit :

$$\left[\alpha\frac{dP}{dx}\right]_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} = \underbrace{\boxed{\alpha_{i+\frac{1}{2}}\left.\frac{dP}{dx}\right|_{i+\frac{1}{2}}^{-}}}_{A} - \alpha_{i-\frac{1}{2}}\left.\frac{dP}{dx}\right|_{i-\frac{1}{2}}^{-} \tag{2.114}$$

La précision de calcul se verra affecté du fait du saut de gradient. Pour y remédier,le terme $A$ est

modifié avec la méthode utilisée dans le $1^{er}$ cas :

$$\approx \alpha_{i+\frac{1}{2}} \frac{(P_{i+1} - a_\Gamma) - P_i}{\Delta x_i} - b_\Gamma - \alpha_{i-\frac{1}{2}} \frac{P_i - P_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} \tag{2.115}$$

$$\approx \alpha_{i+\frac{1}{2}} \frac{P_{i+1} - P_i}{\Delta x_i} - \alpha_{i-\frac{1}{2}} \frac{P_i - P_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} \underbrace{\boxed{-\alpha_{i+\frac{1}{2}} \frac{a_\Gamma}{\Delta x_i} - b_\Gamma}}_{2^{nd} membre} \tag{2.116}$$

Où $b_\Gamma$ est défini de la même manière que $a_\Gamma$. Outre les cas à envisager pour prendre en compte le saut (éventuel) de la variable, les tests suivants sont à effectuer :

1. Si $x_i \in \Omega^-$
   - Si $x_{i+1} \in \Omega^+$ : $b_\Gamma$ est ajouté au $2^{nd}$ membre
   - Si $x_{i-1} \in \Omega^+$ : $-b_\Gamma$ est ajouté au $2^{nd}$ membre
2. Si $x_i \in \Omega^+$
   - Si $x_{i+1} \in \Omega^-$ : $-b_\Gamma$ est ajouté au $2^{nd}$ membre
   - Si $x_{i-1} \in \Omega^-$ : $b_\Gamma$ est ajouté au $2^{nd}$ membre

**$3^{\text{ème}}$ cas : Le coefficient $\alpha$ est discontinu (méthode « sous-maille »)**

La méthode de sous-maille permet de faire une discrétisation de l'équation de Poisson où le coefficient $\alpha$ est discontinu à travers l'interface et vaut $\alpha^-$ dans $\Omega^-$ et $\alpha^+$ dans $\Omega^+$. Si $[x_i, x_{i+1}]$ est traversé par l'interface et que $x_i \in \Omega^-$ :

$$b_\Gamma = \alpha^+ \left( \frac{P_{i+1} - P_\Gamma}{(1-\theta)\Delta x_i} \right) - \alpha^- \left( \frac{P_\Gamma - P_i}{\theta \Delta x_i} \right) \tag{2.117}$$

$$\theta = \frac{|\phi_i|}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|} \tag{2.118}$$

La variable $P_\Gamma$ est calculée en développant (2.117). La discrétisation de (2.108) qui utilise la valeur de $P$ à l'interface est donnée dans (2.121) dans le cas où $\forall x \; a(x) = 0$.

$$P_\Gamma = \frac{\alpha^+ \theta P_{i+1} + \alpha^-(1-\theta) P_i - b_\Gamma \Delta x_i \theta (1-\theta)}{\alpha^+ \theta + \alpha^-(1-\theta)} \tag{2.119}$$

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}} \left. \frac{dP}{dx} \right|_{i+\frac{1}{2}} \approx \alpha^- \left( \frac{P_\Gamma - P_i}{\theta \Delta x_i} \right) \tag{2.120}$$

$$\approx \bar{\alpha} \left( \frac{P_{i+1} - P_i}{\Delta x_i} \right) - \frac{\bar{\alpha} b_\Gamma (1-\theta)}{\alpha^+} \tag{2.121}$$

Où $\bar{\alpha}$ est la moyenne harmonique des coefficients $\alpha^+$ et $\alpha^-$ et s'écrit :

$$\bar{\alpha} = \frac{\alpha^+\alpha^-}{\alpha^+\theta + \alpha^-(1-\theta)} \tag{2.122}$$

Un raisonnement analogue est réalisé pour $x_i \in \Omega^-$ et $x_{i-1} \in \Omega^+$, $x_i \in \Omega^+$ et $x_{i+1} \in \Omega^-$ et pour $x_i \in \Omega^+$ et $x_{i-1} \in \Omega^-$. L'algorithme d'inversion matricielle utilisé dans $\mathcal{DIVA}$, le gradient conjugué préconditionné, n'est valable que pour les matrices symétriques définies positives. $A$ vérifie ces propriétés si $\alpha_{i+\frac{1}{2}} = \bar{\alpha}$. Un résumé des résultats est donné dans le paragraphe suivant.

**Résumé**

Si $a(x) \neq 0$ et $b(x) \neq 0$, les effets sont cumulés et la prise en compte des conditions de saut consiste à ajouter les quantités $F_1, F_2, F_3$ et $F_4$ au second membre. Le coefficient $\alpha$ est défini comme suit :

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \text{Si } x_i \in \Omega^\pm \quad \text{et } x_{i+1} \in \Omega^\pm & \alpha_{i+\frac{1}{2}} = \alpha^\pm \\ \text{Si } \phi_i \leqslant 0 \quad \text{et } \phi_{i+1} > 0 & \alpha_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{\alpha^+\alpha^-(|\phi_i| + |\phi_{i+1}|)}{\alpha^+|\phi_i| + \alpha^-|\phi_{i+1}|} \\ \text{Si } \phi_i > 0 \quad \text{et } \phi_{i+1} \leqslant 0 & \alpha_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{\alpha^+\alpha^-(|\phi_i| + |\phi_{i+1}|)}{\alpha^-|\phi_i| + \alpha^+|\phi_{i+1}|} \end{cases} \tag{2.123}$$

La normale $\vec{n} = \pm 1$ est extérieure à $\Omega^-$, la condition de saut du gradient s'écrit donc :

$$\left[\alpha \frac{dP}{dx}.\vec{n}\right]_\Gamma = \left[\alpha \frac{dP}{dx}\right]_\Gamma \vec{n} = b_\Gamma$$

Si l'interface coupe le segment $[x_{i-1}, x_i]$, le second membre du système linéaire (noté $\mathcal{B}$) résultant de la discrétisation doit prendre en compte les conditions de saut dépendant des variables $\theta, a_\Gamma$ et $b_\Gamma$.

$$\theta = \frac{|\phi_{i-1}|}{|\phi_i| + |\phi_{i-1}|} \tag{2.124}$$

$$a_\Gamma = a_i\theta + a_{i-1}(1-\theta) \tag{2.125}$$

$$b_\Gamma = b_i\theta n_i + b_{i-1}(1-\theta)n_{i-1} \tag{2.126}$$

1. Si $x_i \in \Omega^-$

$$\begin{cases} \text{Si } x_{i-1} \in \Omega^+ & F_1 = \alpha_{i-\frac{1}{2}}\left(\dfrac{a_\Gamma}{\Delta x_{i-1}} - \dfrac{b_\Gamma\theta}{\alpha^+}\right) \\ \text{Sinon} & F_1 = 0 \end{cases}$$

2. Si $x_i \in \Omega^+$
$$\begin{cases} \text{Si } x_{i-1} \in \Omega^- & F_2 = -\alpha_{i-\frac{1}{2}} \left( \dfrac{a_\Gamma}{\Delta x_{i-1}} - \dfrac{b_\Gamma \theta}{\alpha^-} \right) \\ \text{Sinon} & F_2 = 0 \end{cases}$$

Si l'interface coupe le segment $[x_i, x_{i+1}]$, au second membre sont ajoutés $F_3$ et $F_4$ qui dépendent de $\theta, a_\Gamma$ et $b_\Gamma$ :

$$\theta = \frac{|\phi_{i+1}|}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|} \tag{2.127}$$

$$a_\Gamma = a_i\theta + a_{i+1}(1-\theta) \tag{2.128}$$

$$b_\Gamma = b_i\theta n_i + b_{i+1}(1-\theta)n_{i+1} \tag{2.129}$$

1. Si $x_i \in \Omega^-$
$$\begin{cases} \text{Si } x_{i+1} \in \Omega^+ & F_3 = \alpha_{i+\frac{1}{2}} \left( \dfrac{a_\Gamma}{\Delta x_i} + \dfrac{b_\Gamma \theta}{\alpha^+} \right) \\ \text{Sinon} & F_3 = 0 \end{cases}$$

2. Si $x_i \in \Omega^+$
$$\begin{cases} \text{Si } x_{i+1} \in \Omega^- & F_4 = -\alpha_{i+\frac{1}{2}} \left( \dfrac{a_\Gamma}{\Delta x_i} + \dfrac{b_\Gamma \theta}{\alpha^-} \right) \\ \text{Sinon} & F_4 = 0 \end{cases}$$

Finalement, le système linéaire résultant a pour second membre le vecteur suivant et conserve la même matrice $A$ de discrétisation :

$$B_i = f_i \Delta x_{i-\frac{1}{2}} + F_1 + F_2 + F_3 + F_4$$

Les configurations 2D et 3D nécessitent une adaptation de la méthode Ghost Fluid qui fait l'objet du paragraphe suivant.

### 2.5.2 Généralisation multidimensionnelle de la méthode Ghost Fluid

À présent, le but est de résoudre l'équation de Poisson dans les cas 2D et 3D avec les conditions de saut données dans (2.105). La discrétisation est donnée pour la configuration 2D, le cas 3D se déduisant facilement.

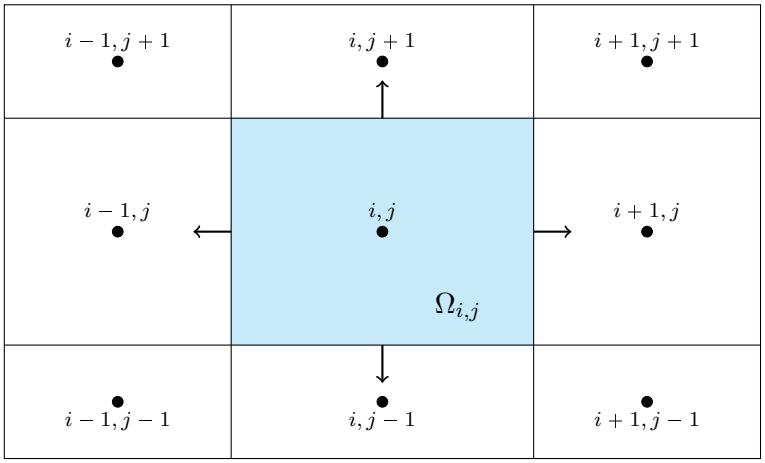



FIGURE 2.6 – Maillage non uniforme en 2 dimensions

La condition de saut du gradient est donnée suivant la normale sortante du domaine $\Omega^-$, notée $\vec{n}$. Il convient de rappeler que $\phi(\vec{x}) \leqslant 0$ si $\vec{x} \in \Omega^-$ et $\phi(\vec{x}) > 0$ si $\vec{x} \in \Omega^+$ et qu'en 2D $\vec{n} = (n^1, n^2)$.Les coordonnées des vecteurs $\vec{n}$ et $\vec{t}$ sont illustrés dans le repère cartésien dans la Fig. 2.7 :

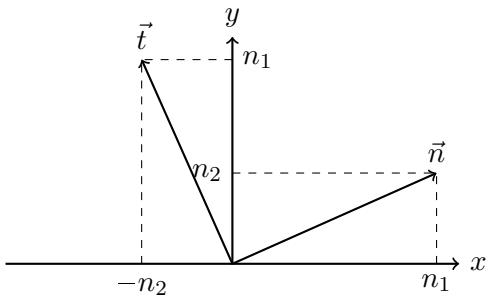



FIGURE 2.7 – Repère cartésien et vecteurs normal et tangent à l'interface

Le gradient de P suivant le vecteur normal $\vec{n}$ et suivant le vecteur tangent $\vec{t}$ à l'interface peut donc s'écrire :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \nabla P \,.\, \vec{n} & = & \dfrac{\partial P}{\partial x} n^1 + \dfrac{\partial P}{\partial y} n^2 \\ \\ \nabla P \,.\, \vec{t} & = & \dfrac{\partial P}{\partial x} n^2 - \dfrac{\partial P}{\partial y} n^1 \end{array} \right. \iff \left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial P}{\partial x} = (\nabla P \,.\, \vec{n}\,)\, n^1 + \left(\nabla P \,.\, \vec{t}\,\right) n^2 \\ \\ \dfrac{\partial P}{\partial y} = (\nabla P \,.\, \vec{n}\,)\, n^2 - \left(\nabla P \,.\, \vec{t}\,\right) n^1 \end{array} \right. \tag{2.130}$$

Le saut de chacune des dérivés partielles suivant $\vec{x}$ et $\vec{y}$ s'écrit en fonction du saut du gradient de P

suivant les directions $\vec{n}$ et $\vec{t}$ :

$$\left[\alpha\frac{\partial P}{\partial x}\right]_\Gamma = \left[\alpha\left(\nabla P \,.\, \vec{n}\,\right)\right]_\Gamma n^1 + \left[\alpha\left(\nabla P \,.\, \vec{t}\,\right)\right]_\Gamma n^2$$

$$\left[\alpha\frac{\partial P}{\partial y}\right]_\Gamma = \left[\alpha\left(\nabla P \,.\, \vec{n}\,\right)\right]_\Gamma n^2 - \left[\alpha\left(\nabla P \,.\, \vec{t}\,\right)\right]_\Gamma n^1$$

La condition de saut n'est connue que suivant la normale mais si l'on suppose que $\left[\alpha\left(\nabla P \,.\, \vec{t}\,\right)\right]_\Gamma = 0$, il est possible de connaitre la condition de saut de chacune des dérivées partielles et donc de traiter le problème composante par composante :

$$\begin{aligned}\left[\alpha\frac{\partial P}{\partial x}\right]_\Gamma &= b(x_\Gamma)\; n^1 \\ \left[\alpha\frac{\partial P}{\partial y}\right]_\Gamma &= b(x_\Gamma)\; n^2\end{aligned} \tag{2.131}$$

La discrétisation de type « Volumes Finis »en 2D sur une maille $\Omega_{i,j}$ centrée au point $(x_i, y_j)$ pour un maillage non-uniforme (*cf* Fig. 2.6) s'écrit :

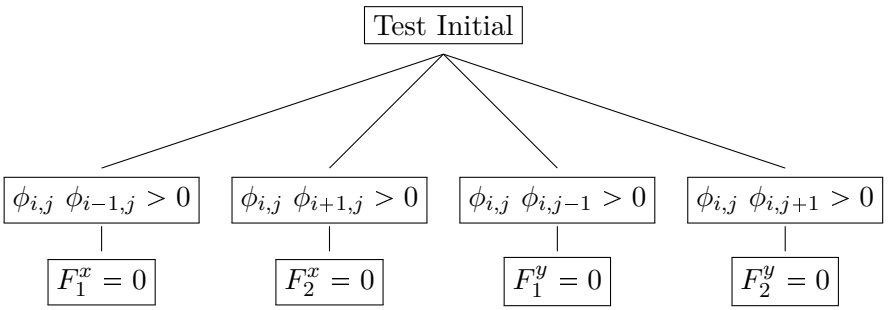
$$\begin{aligned}\int_{\Omega_{i,j}} \nabla \,.\, (\alpha\nabla P)\, dV &= \int_{\partial\Omega_{i,j}} \alpha\nabla P \,.\, \vec{n} dS \\ &= \int_{\Omega_{i,j}} f dV\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow\quad & \alpha_{i+\frac{1}{2},j}\Delta y_{j-\frac{1}{2}}\left(\frac{P_{i+1,j}-P_{i,j}}{\Delta x_i}\right) - \alpha_{i-\frac{1}{2},j}\Delta y_{j-\frac{1}{2}}\left(\frac{P_{i,j}-P_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1}}\right) + \alpha_{i,j+\frac{1}{2}}\Delta x_{i-\frac{1}{2}}\left(\frac{P_{i,j+1}-P_{i,j}}{\Delta y_j}\right) \\ & -\alpha_{i,j-\frac{1}{2}}\Delta x_{i-\frac{1}{2}}\left(\frac{P_{i,j}-P_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1}}\right) = f_{i,j}\;\mathcal{V}_{i,j} + F^x + F^y\end{aligned} \tag{2.132}$$

$\mathcal{V}_{i,j}$ est le volume de la maille $\Omega_{i,j}$ qui vaut $\Delta x_{i-\frac{1}{2}} \,.\, \Delta y_{j-\frac{1}{2}}$, et $F^x$ et $F^y$ sont les contributions à ajouter au second membre du fait des conditions de saut à l'interface suivant $\vec{x}$ et $\vec{y}$ respectivement :

$$F^x = F_1^x + F_2^x \qquad\qquad F^y = F_1^y + F_2^y \tag{2.133}$$

Les valeurs des contributions sont nulles dans le cas où l'interface ne passe pas entre les points considérés. Le graphe suivant résume ce type de cas :




Pour obtenir une discrétisation symétrique, les coefficients $\alpha_{i+\frac{1}{2},j}$ et $\alpha_{i,j+\frac{1}{2}}$ sont définis dans (2.134) et (2.135) où $X_{i,j} = (x_i, y_j)$.

$$\alpha_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} \text{Si } X_{i,j} \in \Omega^{\pm} \quad \text{et } X_{i+1,j} \in \Omega^{\pm} & \alpha_{i+\frac{1}{2},j} = \alpha^{\pm} \\ \text{Si } \phi_{i,j} \leqslant 0 \quad \text{et } \phi_{i+1,j} > 0 & \alpha_{i+\frac{1}{2},j} = \dfrac{\alpha^+\alpha^-(|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}|)}{\alpha^+|\phi_{i,j}| + \alpha^-|\phi_{i+1,j}|} \\ \text{Si } \phi_{i,j} > 0 \quad \text{et } \phi_{i+1,j} \leqslant 0 & \alpha_{i+\frac{1}{2},j} = \dfrac{\alpha^+\alpha^-(|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}|)}{\alpha^-|\phi_{i,j}| + \alpha^+|\phi_{i+1,j}|} \end{cases} \tag{2.134}$$

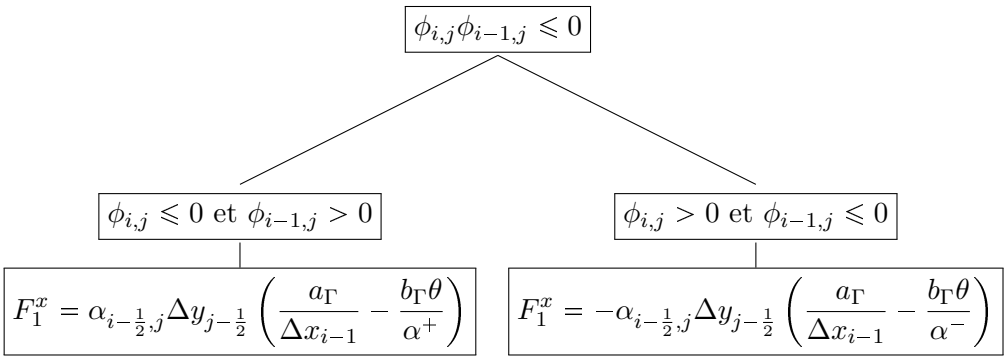
$$\alpha_{i,j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \text{Si } X_{i,j} \in \Omega^{\pm} \quad \text{et } X_{i,j+1} \in \Omega^{\pm} & \alpha_{i,j+\frac{1}{2}} = \alpha^{\pm} \\ \text{Si } \phi_{i,j} \leqslant 0 \quad \text{et } \phi_{i,j+1} > 0 & \alpha_{i,j+\frac{1}{2}} = \dfrac{\alpha^+\alpha^-(|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j+1}|)}{\alpha^+|\phi_{i,j}| + \alpha^-|\phi_{i,j+1}|} \\ \text{Si } \phi_{i,j} > 0 \quad \text{et } \phi_{i,j+1} \leqslant 0 & \alpha_{i,j+\frac{1}{2}} = \dfrac{\alpha^+\alpha^-(|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j+1}|)}{\alpha^-|\phi_{i,j}| + \alpha^+|\phi_{i,j+1}|} \end{cases} \tag{2.135}$$

Si l'interface coupe le segment $[x_{i-1}, x_i]$, les conditions de saut impliquent une contribution non nulle $F_1^x$ qui dépend de $\theta$, $a_\Gamma$ et $b_\Gamma$ définis ci-après :

$$\theta = \frac{|\phi_{i-1,j}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i-1,j}|}$$

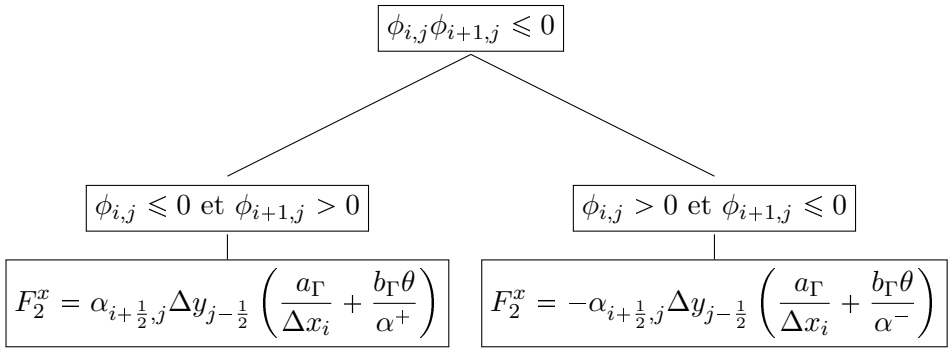
$$a_\Gamma = a_{i,j}\ \theta + a_{i-1,j}\ (1-\theta)$$

$$b_\Gamma = b_{i,j}\ n^1_{i,j}\ \theta + b_{i-1,j}\ n^1_{i-1,j}\ (1-\theta)$$



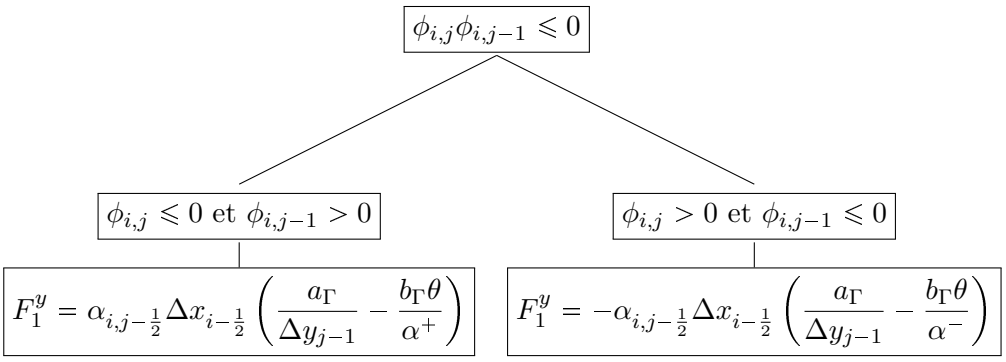

Si l'interface coupe le segment $[x_i, x_{i+1}]$, la contribution $F_2^x$ est non nulle et dépend toujours de $\theta$, $a_\Gamma$ et $b_\Gamma$ redéfinis ci-après :

$$\begin{aligned}
\theta &= \frac{|\phi_{i+1,j}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}|} \\
a_\Gamma &= a_{i,j}\ \theta + a_{i+1,j}\ (1-\theta) \\
b_\Gamma &= b_{i,j}\ n^1_{i,j}\ \theta + b_{i+1,j}\ n^1_{i+1,j}\ (1-\theta)
\end{aligned}$$



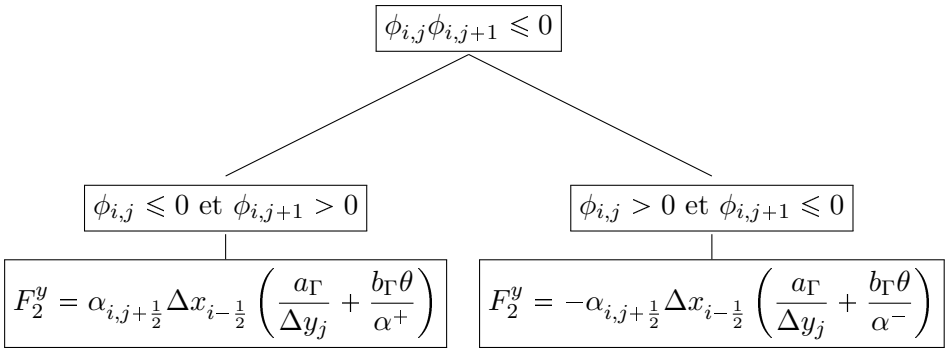

Si l'interface coupe le segment $[y_{j-1}, y_j]$, la contribution $F_1^y$ est non nulle :

$$\begin{aligned}
\theta &= \frac{|\phi_{i,j-1}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j-1}|} \\
a_\Gamma &= a_{i,j}\ \theta + a_{i,j-1}\ (1-\theta) \\
b_\Gamma &= b_{i,j}\ n^2_{i,j}\ \theta + b_{i,j-1}\ n^2_{i,j-1}\ (1-\theta)
\end{aligned}$$




Si l'interface coupe le segment $[y_j, y_{j+1}]$, la contribution $F_2^y$ est non nulle :

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{|\phi_{i,j+1}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j+1}|} \\ a_\Gamma &= a_{i,j}\ \theta + a_{i,j+1}\ (1-\theta) \\ b_\Gamma &= b_{i,j}\ n_{i,j}^2\ \theta + b_{i,j+1}\ n_{i,j+1}^2\ (1-\theta) \end{aligned}$$




La méthode Ghost-Fluid et toutes les méthodes numériques implémentées pour résoudre l'équation de Navier-Stokes avec la condition d'incompressibilité sont validées à l'aide des cas test présentés par *S. Tanguy* dans [98] et les cas présentés ci-après.

## 2.6 Validation de l'algorithme de résolution des écoulements diphasiques

La simulation numérique directe d'écoulements contenant un grand nombre de bulles ou de gouttes (sprays) est un défi ambitieux. L'une des principales difficultés rencontrées lorsque l'on s'intéresse à ce type d'écoulements réside dans les temps de calcul prohibitifs. Le développement croissant du calcul à haute performance (HPC) ne suffit pas à augmenter considérablement le nombre de bulles ou de gouttes dans les simulations et il est également souhaitable de développer en parallèle des méthodes numériques plus précises.

De ce fait, si un calcul est aussi précis qu'un autre avec deux fois moins de mailles dans un diamètre de bulle, il est possible de faire des simulations avec 8 fois plus de bulles à ressources informatiques équivalentes. De plus, si l'algorithme est explicite, un gain important sur le pas de temps aura également été possible.

Deux cas tests sont analysés pour vérifier la pertinence des différentes méthodes implémentées. Dans un premier temps, des simulations de gouttes sphériques en ascension sous l'effet de la gravité sont effectuées avec les méthodes « Ghost Fluid Primitive Viscous Method », « Ghost Fluid Conservative Viscous Method », « Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous Method explicite », « Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous Method Implicite » et CSF. Elles sont ensuite comparées au cas théorique et entre elles. Dans le deuxième cas de validation, la simulation d'une goutte non-sphérique en ascension dans un liquide très visqueux est effectuée avec chacune des approches de calcul du terme visqueux.

### 2.6.1 Bulles sphérique en ascension sous l'effet de la gravité

Les simulations numériques effectuées dans cette partie permettent d'évaluer les différentes méthodes de discrétisation du terme visqueux. L'étude porte sur la simulation d'une bulle d'air sphérique dans l'eau en ascension sous l'effet de la gravité sans vitesse initiale. Ce cas test est particulièrement adapté pour mesurer la capacité d'une méthode à bien prendre en compte le terme visqueux. En effet, puisqu'il n'y a pas de trainée de pression, les erreurs générées par le calcul seront essentiellement attribuées au traitement du terme visqueux.

Les caractéristiques spécifiques à chacune des simulations effectuées sont résumées ci dessous et dans le tableau 2.1 :

- La bulle est initialement sphérique et les simulations sont effectuées à faible nombre de Bond afin de conserver cette forme :
  - $B_o = 0,025$ pour les $Re_\infty = 20,\ 40,\ 60$
  - $B_o = 0,0125$ pour les $Re_\infty = 80,\ 100$
- Système de coordonnées 2D axi-symétrique.
- Le domaine de calcul est fonction du rayon de la bulle noté $R_{bulle}$ et est choisi pour diminuer au maximum l'influence de la paroi ou des conditions aux limites sur le comportement de la bulle :
  - $l_r = 8\ R_{bulle}$
  - $l_z = 4\ l_r$
- Les propriétés du liquide et du gaz sont ceux de l'eau et l'air pour toutes les simulations ($\rho_{liq} = 1000\ kg.m^{-3}$, $\mu_{liq} = 0,00113\ kg.m^{-1}.s^{-1}$,$\rho_{gaz} = 1,226\ kg.m^{-3}$, $\mu_{gaz} = 1,78.10^{-5}\ kg.m^{-1}.s^{-1}$ etc )
- Pour chaque nombre de Reynolds, trois simulations avec des maillages de $32 \times 128, 64 \times 256$ et $128 \times 512$ mailles ont été effectuées, soit respectivement 8, 16 et 32 mailles par diamètre de bulle.

| | $Re_\infty = 20$ | $Re_\infty = 40$ | $Re_\infty = 60$ | $Re_\infty = 80$ | $Re_\infty = 100$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $R_{bulle}\ (\mu m)$ | $19,55$ | $44,65$ | $70,45$ | $98,95$ | $127,9$ |
| $g_z\ (m\ .\ s^{-2})$ | $-9144,4$ | $-1755,2$ | $-705,6$ | $-357,5$ | $-213,9$ |
| $\sigma\ (N\ .\ m^{-1})$ | $0,56$ | $0,56$ | $0,56$ | $1,12$ | $1,12$ |
| $t_{final}\ (s)$ | $0,0004$ | $0,00135$ | $0,002375$ | $0,0048$ | $0,007$ |

TABLE 2.1 – Rayon de la bulle, accélération de la gravité, coefficient de tension superficielle et temps final de simulation de bulles en ascension pour cinq nombre de Reynolds différents.

La figure 2.8 est le résultat de la simulation d'une bulle d'air sphérique dans l'eau de rayon $70,45\ \mu m$ en ascension sous l'effet d'une gravité $\vec{g} = -705,6\vec{e}_z\ m\ .\ s^{-2}$ avec un Reynolds final d'ascension $Re_\infty = 60$. Les lignes de courant et la vorticité dans le domaine mettent en évidence une zone de recirculation dans la bulle.

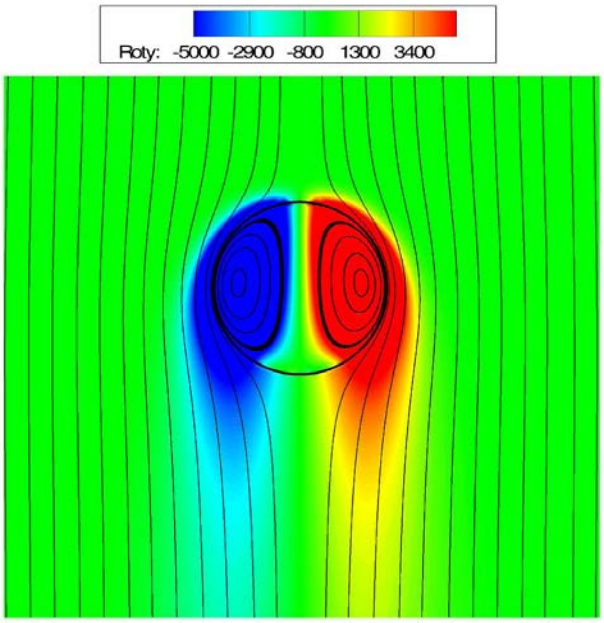



FIGURE 2.8 – Lignes de courant et champ de vorticité (en $s^{-1}$) d'une bulle sphérique en ascension à $Re_\infty = 60$. Simulation effectuée avec la méthode « Ghost Fluid Conservative Viscous method » dans un maillage uniforme de $128 \times 512$ mailles.

Les simulations numériques effectuées sont évaluées à l'aide des résultats numériques de *Oliver & Chung* présentés dans [75] pour les $Re_\infty = 20$ et 40 et avec la théorie de Moore [68] pour les $Re_\infty = 60,\ 80$ et 100. Les pourcentages d'erreur sont présentés dans les tableaux 2.2, 2.3, 2.4, 2.5 et 2.6 qui correspondent aux simulations avec les méthodes GFCVM, GFSCVM explicite, GFSCVM implicite, GFPVM et Delta-Function respectivement.

Ces résultats montrent que pour le maillage le plus grossier ($32 \times 128$), les méthodes n'arrivent pas à reproduire le bon résultat : les pourcentages d'erreur sont supérieurs à 30% quelque soit le nombre $Re_\infty$. La méthode GFCVM présente la meilleure concordance avec les résultats théoriques pour les maillages $64 \times 256$ et $128 \times 512$ les erreurs étant toutes $< 3\%$ indépendemment du nombre de Reynolds.

Les méthodes GFSCVM et GFPVM donnent également de bons résultats pour les maillages plus fins puisque les erreurs sont $< 5\%$ pour la plupart. La méthode GFSCVM est quant à elle un peu moins précise que les deux autres mais bien plus précise que la méthode CSF dont les erreurs sont $> 7\%$ pour tous les nombres de Reynolds $Re_\infty$ sur le maillage le plus fin.

| Maillage | $Re_\infty = 20$ | $Re_\infty = 40$ | $Re_\infty = 60$ | $Re_\infty = 80$ | $Re_\infty = 100$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $32 \times 128$ | $-22,0$ % | $-34,0$ % | $-38,8$ % | $-63,0$ % | $-67,4$ % |
| $64 \times 256$ | $+2,5$ % | $+1,8$ % | $-1,3$ % | $-1,3$ % | $-3,0$ % |
| $128 \times 512$ | $+0,5$ % | $+0,8$ % | $-1$ % | $+1,9$ % | $+1,9$ % |

TABLE 2.2 – Pourcentage d'erreur du Reynolds terminal d'une bulle en ascension pour cinq nombres de Reynolds théoriques et trois maillages différents. Utilisation de la méthode GFCVM.

| Maillage | $Re_\infty = 20$ | $Re_\infty = 40$ | $Re_\infty = 60$ | $Re_\infty = 80$ | $Re_\infty = 100$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $32 \times 128$ | $-23,5$ % | $-32,5$ % | $-39,0$ % | $-62,5$ % | $-67,0$ % |
| $64 \times 256$ | $-0,5$ % | $+2,5$ % | $+1,33$ % | $+4,3$ % | $+3,0$ % |
| $128 \times 512$ | $-3,5$ % | $+0,6$ % | $+0,7$ % | $+5,4$ % | $+6$ % |

TABLE 2.3 – Pourcentage d'erreur du Reynolds terminal d'une bulle en ascension pour cinq nombres de Reynolds théoriques et trois maillages différents. Utilisation de la méthode GFSCVM explicite .

| Maillage | $Re_\infty = 20$ | $Re_\infty = 40$ | $Re_\infty = 60$ | $Re_\infty = 80$ | $Re_\infty = 100$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $32 \times 128$ | $-18,6$ % | $-25$ % | $-30,2$ % | $-52,9$ % | $-55,1$ % |
| $64 \times 256$ | $-1,15$ % | $+1,47$ % | $-0,12$ % | $+2,0$ % | $+0,9$ % |
| $128 \times 512$ | $-3,68$ % | $+0,08$ % | $-0,16$ % | $+3,24$ % | $+3,9$ % |

TABLE 2.4 – Pourcentage d'erreur du Reynolds terminal d'une bulle en ascension pour cinq nombres de Reynolds théoriques et trois maillages différents. Utilisation de la méthode GFSCVM implicite .

| Maillage | $Re_\infty = 20$ | $Re_\infty = 40$ | $Re_\infty = 60$ | $Re_\infty = 80$ | $Re_\infty = 100$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $32 \times 128$ | $-16,7$ % | $-24,6$ % | $-31,5$ % | $-52,3$ % | $-56,8$ % |
| $64 \times 256$ | $+0,5$ % | $-1,2$ % | $-4,5$ % | $-4,8$ % | $-6,6$ % |
| $128 \times 512$ | $+0,1$ % | $-0,3$ % | $-2,6$ % | $-1,0$ % | $-1,6$ % |

TABLE 2.5 – Pourcentage d'erreur du Reynolds terminal d'une bulle en ascension pour cinq nombres de Reynolds théoriques et trois maillages différents. Utilisation de la méthode GFPVM.

| Maillage | $Re_\infty = 20$ | $Re_\infty = 40$ | $Re_\infty = 60$ | $Re_\infty = 80$ | $Re_\infty = 100$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $32 \times 128$ | $-39,5$ % | $-46,1$ % | $-53,8$ % | $-75,8$ % | $-81,6$ % |
| $64 \times 256$ | $-16,5$ % | $-18,3$ % | $-21,7$ % | $-29,3$ % | $-31,8$ % |
| $128 \times 512$ | $-7,5$ % | $-7,9$ % | $-9,9$ % | $-10,5$ % | $-10,9$ % |

TABLE 2.6 – Pourcentage d'erreur du Reynolds terminal d'une bulle en ascension pour cinq nombres de Reynolds théoriques et trois maillages différents. Utilisation de la méthode Delta Function ou méthode CSF

### 2.6.2 Bulle en ascension dans un fluide visqueux à $Re_\infty = 20$

L'ascension d'une bulle non-sphérique dans une fluide très visqueux est à présent modélisée avec les différentes méthodes de calcul du terme visqueux. Ce cas test qui s'appuie sur les résultats experimentaux effectués par *Hnat & Buckmaster* dans [48] a été maintes fois utilisé pour valider des résultats numériques.

Sur cette bulle déformée s'applique une force de traînée qui provient des effets visqueux mais aussi des effets de pression, d'où l'intêret de ce cas test. Les caractéristiques des simulations effectués sont présentées ci-après :

- La bulle est initialement sphérique de rayon $R_{bulle} = 0.0061m$ et se déforme au cours du temps pour aboutir à un état stationnaire où le nombre de Reynolds vaut $19,6$
- Système de coordonnées 2D axi-symétrique.
- Le domaine de calcul est également fonction du rayon de la bulle noté $R_{bulle}$ et assez grand pour diminuer au maximum les effets de paroi :
  - $l_r = 8\ R_{bulle}$
  - $l_z = 4\ l_r$
- Les propriétés du liquide et du gaz sont listées ci-dessous :
  - masse volumique et viscosité du liquide : $\rho_{liq} = 875,5\ kg.m^{-3}$ et $\mu_{liq} = 0,00118\ kg.m^{-1}.s^{-1}$
  - masse volumique et viscosité du gaz : $\rho_{gaz} = 1\ kg.m^{-3}$ et $\mu_{gaz} = 0,001 kg.m^{-1}.s^{-1}$
  - tension de surface : $\sigma = 0,0332\ N.m^{-1}$
  - accéleration de la pesanteur : $g_z = -9,81\ m.s^{-2}$
- Les simulations sont effectuées avec un maillage uniforme de $128 \times 512$ mailles.

Dans la figure 2.9 sont représentées les lignes de courant dans le domaine qui mettent en évidence une zone de recirculation apparaissant à l'arrière de la bulle lorsqu'elle se déforme. Cette figure est issue

d'une simulation effectuée avec la méthode GFCVM qui reproduit le mieux les expériences de *Hnat & Buckmaster*.

Le tableau 2.7 présente les pourcentages d'erreur entre chaque méthode et les résultats expérimentaux. Dans ce cas, c'est les méthodes GFCVM et CSF qui modélisent le mieux les expériences. La méthode GFSCVM reste fidèle aux expériences puisque l'erreur est de $6,9\%$.

| Méthode numérique | Re | Erreur sur le Re |
|---|---|---|
| Ghost Fluid Conservative Viscous Method | $18,79$ | $-4,1$ % |
| Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous Method Implicite | $18,25$ | $-6,9$ % |
| Ghost Fluid Primitive Viscous Method | $18,59$ | $-5,2$ % |
| CSF | $18,73$ | $-4,4$ % |

TABLE 2.7 – Comparaison des différentes approches utilisées pour prendre en compte le terme visqueux avec un maillage $128 \times 512$ et un Reynolds final d'ascension $Re = 19,6$

Le nombre de Reynolds au cours du temps adimentionnel $t\sqrt{(g/D)}$ est représenté dans la figure 2.10. Cette courbe montre que les simulations numériques avec les différentes méthodes atteignent toutes un état stationnaire plus ou moins proche de l'état stationnaire théorique qui vaut $Re = 19,6$.

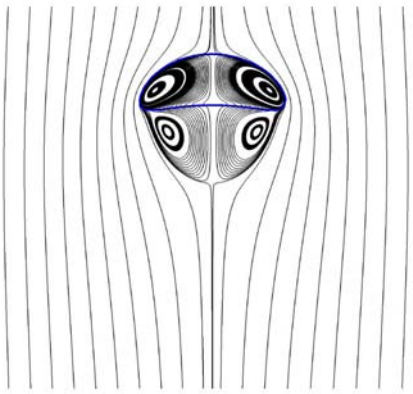


FIGURE 2.9 – Lignes de courant et interface (en bleu) d'une bulle en ascension dans un fluide visqueux à $Re = 19,6$. Simulation effectuée avec la méthode GFCVM dans un maillage $128 \times 512$

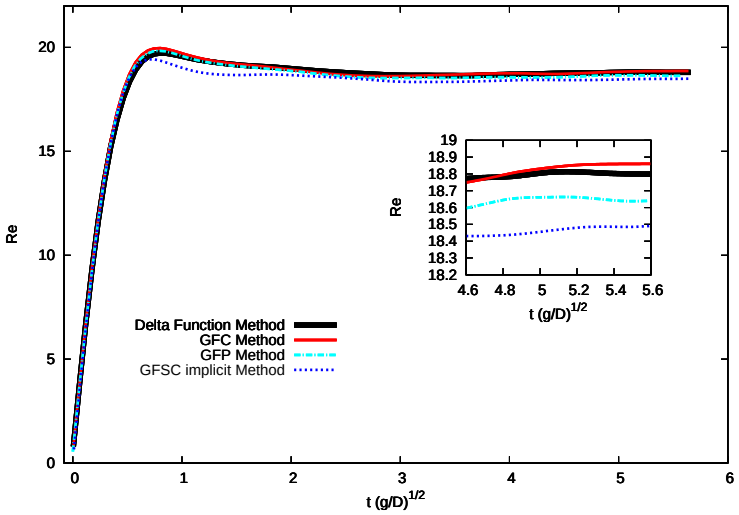



FIGURE 2.10 – Evolution temporelle du nombre de Reynolds pour chacune des simulations d'une bulle en ascension dans un fluide très visqueux avec les différentes méthodes de calcul du terme visqueux

Chapitre 3

# Développements numériques pour l'évaporation et l'ébullition

## Sommaire


**3.1 Equations de conservation de l'énergie et des espèces chimiques . . . . . 79**
3.1.1 Equation de l'énergie . . . . . 79
3.1.2 Equation des espèces chimiques . . . . . 83
3.1.3 Relation thermodynamique et conditions de saut . . . . . 84
**3.2 Algorithme de résolution des équations de l'énergie et des espèces chimiques . 88**
3.2.1 Solveur thermique pour l'ébullition (GFTSB) . . . . . 90
3.2.2 Solveur thermique pour l'évaporation (GFTSE) . . . . . 92
3.2.3 Solveur thermique pour l'évaporation et l'ébullition (GFTSEB) . . . . . 94
**3.3 Résolution spatiale des équations de l'énergie et des espèces chimiques . . . . . 96**
3.3.1 Discrétisation de l'équation de la température dans un domaine irrégulier avec une condition de Dirichlet à l'interface . . . . . 96
3.3.2 Résolution spatiale sur un domaine 2D de l'équation de conservation des espèces munie d'une condition de Robin à l'interface . . . . . 98
3.3.3 Calcul géométrique de volumes et surfaces . . . . . 100
**3.4 Techniques d'extrapolation et calcul du taux de changement de phase . . . . . 105**
3.4.1 Technique d'extrapolation multidimensionelle . . . . . 105
3.4.2 Calcul du débit de vaporisation lors d'un changement de phase . . . . . 111
**3.5 Résolution des équations de Navier-Stokes avec un saut de vitesse . . . . . 112**
3.5.1 Traitement implicite des termes visqueux en présence de changement de phase . . . 112
3.5.2 Extrapolation constante du champ de vitesses et extrapolation respectant la condition d'incompressibilité . . . . . 115
3.5.3 Transport de l'interface en présence de changement de phase . . . . . 115
**3.6 Validation des modèles . . . . . 116**
3.6.1 Commentaires sur le modèle thermodynamique utilisé . . . . . 116
3.6.2 Évaporation d'une goutte quasi-statique : loi de décroissance du diamètre . . . . . 116
3.6.3 Évaporation d'une goutte sphérique en mouvement . . . . . 118
**3.7 Etude de l'évaporation d'une goutte sur une paroi chauffée au-delà de la température d'ébullition du liquide considéré . . . . . 123**


Le chapitre 2 était consacré à la résolution des équations de Navier-Stokes et de continuité qui modélisent l'écoulement d'un ou plusieurs fluides au cours du temps. Jusqu'à présent, les changements

de phase n'ont pas été pris en compte. Ce chapitre est donc dédié à l'étude des changements de phase et des transferts de masse.

Les transferts thermiques surviennent lorsqu'il y a une différence de température entre deux milieux qui sont en contact. Le système passe alors d'un état d'équilibre thermodynamique à un autre par un phénomène de transfert d'énergie thermique. Par exemple, dans le cas d'une goutte posée sur une paroi plus chaude, l'interaction entre le liquide et la paroi entraine une augmentation de sa température principalement par conduction de la chaleur (transfert d'énergie de proche en proche).

D'autres types de transferts thermiques peuvent contribuer aux échanges d'énergie tels que la convection de la chaleur (où l'énergie est transmise par le déplacement d'un fluide) ou le rayonnement (transfert d'énergie electromagnétique rayonnée).

La vaporisation est un changement de phase où le liquide se transforme en gaz et qui est intimement lié à la température et aux compositions du liquide et du milieu environnant. Ce phénomène contribue également au transfert de chaleur entre les milieux.

Dans cette étude sont distingués les sous-régimes d'ébullition et d'évaporation. Le premier régime est un changement de phase d'un liquide pur en vapeur saturée. Ce phénomène se produit lorsque le liquide est chauffé et atteint une température critique (point d'ébullition) ou lors d'une dépression du milieu liquide (cavitation). Le phénomène se déclenche dans un noyau à l'intérieur du liquide (nucléation homogène) ou dans l'interface entre une surface chaude et le liquide (nucléation hétérogène).

La formation d'un régime d'évaporation ne nécessite pas un noyau pour se déclencher mais se produit naturellement à l'interface entre un liquide et un gaz quelques soient les conditions de température et de pression. Le phénomène se produit spontanément lorsqu'un liquide et un gaz de composition chimique différente sont en contact (comme pour l'évaporation d'une goutte d'eau dans l'air par exemple).

Les transferts de chaleur et les changements de phase sont régis par les équations de conservation de l'énergie et des espèces chimiques. Ces équations sont posées dans la première partie à l'aide des lois de la thermodynamique et de la conservation des espèces chimiques. L'écoulement étant diphasique, les variables et leurs dérivées peuvent être discontinues à l'interface : les conditions de saut sont donc établies par la suite. Enfin, les équations permettant de fermer le système sont posées.

Différents algorithmes ont été développés dans la littérature pour résoudre ces équations dans le cas de l'ébullition ou de l'évaporation. Les algorithmes traitant l'ébullition considèrent généralement la température à l'interface connue et égale à la température d'ébullition du liquide. Ce n'est pas le cas des écoulements en présence d'évaporation puisqu'elle peut survenir quelque soit la température à l'interface.

Dans le code $\mathcal{DIVA}$, les algorithmes traitant l'ébullition et l'évaporation sont distincts. Dans le cas de l'ébullition, la température est résolue dans le liquide et dans le gaz de manière indépendante en imposant une condition de Dirichlet à l'interface égale à la température d'ébullition. Le taux de vaporisation est ensuite calculé grâce à la relation qui le lie au saut du gradient de température.

Dans le cas de l'évaporation, la température n'est plus imposée à l'interface et elle est résolue simultanément dans le liquide et dans le gaz avec une condition de saut sur le gradient de température. Pour estimer cette condition de saut, le taux de vaporisation est calculé à l'aide de la fraction massique, ce qui implique de résoudre une équation de conservation supplémentaire. La fraction massique est résolue en imposant une condition de Dirichlet à l'interface estimée avec la relation de Clausius Clapeyron.

Lorsqu'une goutte impacte une paroi chauffée au dessus de la température de Leidenfrost, elle peut être dans un régime hybride : la température de l'interface atteint par endroits la température d'ébullition. Dans ce cas, l'algorithme d'évaporation ne peut être utilisé puisque la relation permettant de calculer le taux de vaporisation à partir de la fraction massique tend vers une indétermination de type

0/0 et l'algorithme diverge.

Un nouvel algorithme a donc été développé et implémenté dans le code $\mathcal{DIVA}$ au cours de cette thèse pour prendre en compte ce régime hybride. Comme dans le cas de l'ébullition, la température est calculée indépendamment dans le liquide et dans le gaz en imposant une condition de Dirichlet qui, dans ce cas, n'est pas forcément égale à la température d'ébullition. Le taux de vaporisation est ensuite calculé grâce à la relation sur le saut du gradient de température. Cet algorithme permet de s'affranchir de l'indétermination et de modéliser naturellement le passage d'un régime d'évaporation à un régime d'ébullition.

Les trois algorithmes d'ébullition, évaporation et hybride seront exposés respectivement dans les partie 3.2.1, 3.2.2 et 3.2.3. Les discrétisations spatiales nécéssaires sont présentées ensuite. Sont décrites notamment la discrétisation d'ordre 2 de l'équation de Poisson dans un domaine irrégulier avec une condition de Dirichlet à l'interface [30] ainsi que la résolution spatiale de l'équation des espèces dans un domaine irrégulier avec une condition de Robin à l'interface [77].

Il est souvent nécessaire de créer des extensions régulières des variables discontinues à l'interface afin de pouvoir différencier ces variables au niveau de l'interface. Les méthodes d'extrapolation développées par *T. Aslam* [2] permettent, à partir des valeurs d'une variable dans un domaine $\Omega_1 \in \Omega$, d'extrapoler un champ continu de cette variable dans tout le domaine $\Omega$. Cette méthode, implémentée dans le code $\mathcal{DIVA}$, fait l'objet de la partie 3.4.1.

Le taux de vaporisation quantifie le transfert de masse du liquide dans le gaz. Cette valeur est calculée de façon différente selon les algorithmes utilisés pour régime (ébullition, évaporation ou hybride) : elle est détaillée par la suite.

Finalement, afin de valider les différentes méthodes numériques de ce chapitre, deux cas tests seront utilisés : l'évaporation d'une goutte en mouvement et l'évaporation d'une goutte posée sur une paroi chaude. La simulation de ce dernier cas n'a été ossible que grâce à l'implémentation de l'algorithme hybride développé au cours de cette thèse.

## 3.1 Equations de conservation de l'énergie et des espèces chimiques

Les équations de conservation de l'énergie et de conservation des espèces chimiques posées dans ce paragraphe modélisent les effets thermiques, les effets de mélange et les changements de phase dans l'écoulement. L'analyse dimensionnelle de l'équation complète de l'énergie permet d'obtenir une équation simplifiée en quantifiant les termes pouvant être négligés. D'autres hypothèses simplificatrices sont également énoncées et justifiées afin d'obtenir un modèle plus simple.

### 3.1.1 Equation de l'énergie

#### Bilan d'énergie sur un élément fluide

Les phénomènes thermiques tels que les transferts de chaleur et les changements de phase peuvent modifier les propriétés des fluides ou générer des discontinuités à l'interface et modifier l'écoulement fluide. Il est donc essentiel de connaitre la température à chaque point du domaine afin de bien modéliser le mouvement. Pour cela, l'équation de conservation de l'énergie qui est établie dans cette partie est résolue.

D'après le premier principe de la thermodynamique, la variation de l'énergie interne $U$ est égale à la somme des travaux des forces et du transfert thermique. L'équation (3.1) découle de l'application de ce principe à une particule fluide de volume $d\Omega$ dans un domaine $\Omega$ :

$$\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t}\int_{\Omega}\rho\left(e+\frac{||\vec{V}||^2}{2}\right)d\Omega=\dot{W}+\dot{Q} \tag{3.1}$$

Où l'opérateur qui représente la dérivée particulaire appliqué à une variable quelconque $A$ s'écrit :

$$\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t}A=\frac{\partial A}{\partial t}+\left(\vec{V}.\nabla\right)A$$

Dans (3.1), $e$ représente l'énergie interne massique en $J.kg^{-1}$, $\dot{W}$ est la puissance mécanique en watts et $\dot{Q}$ la puissance thermique en watts ($W$). La puissance mécanique $\dot{W}$ correspond au travail des forces conservatives telles que la gravité et des forces non conservatives telle que la pression et les forces de frottement :

$$\dot{W}=\int_{\Omega}\rho\left(\vec{V}.\ \vec{g}\right)d\Omega+\int_{\partial\Omega}\left(\bar{\bar{\sigma}}\ .\ \vec{n}\right)\ .\ \vec{V}dS$$

Le tenseur des contraintes $\bar{\bar{\sigma}}$ se décompose comme la somme des contraintes de pression et des contraintes visqueuses. Si $\bar{\bar{I}}$ et $\bar{\bar{\tau}}$ représentent les tenseurs identité et des contraintes visqueuses, $\bar{\bar{D}}$ le tenseur des déformations et $\mu$ la viscosité dynamique, le tenseur $\bar{\bar{\sigma}}$ s'exprime comme suit :

$$\bar{\bar{\sigma}}=-P\bar{\bar{I}}+\bar{\bar{\tau}}$$
$$\bar{\bar{\sigma}}=-P\bar{\bar{I}}+2\mu\bar{\bar{D}}$$

En utilisant le théorème de Green-Ostrogradski, la puissance mécanique s'exprime à l'aide d'une intégrale volumique (3.2) :

$$\dot{W}=\int_{\Omega}\rho\vec{V}.\vec{g}d\Omega+\int_{\Omega}\nabla.\left(\bar{\bar{\sigma}}\ .\ \vec{V}\right)d\Omega \tag{3.2}$$

$$\dot{W}=\int_{\Omega}\left(\rho\vec{V}.\vec{g}+\nabla.\left(P\bar{\bar{I}}\ .\ \vec{V}\right)+\nabla.\left(2\mu\bar{\bar{D}}\ .\ \vec{V}\right)\right)d\Omega \tag{3.3}$$

La puissance thermique provient de la production d'énergie volumique $P_{rod}$ par réaction chimique ou effet joule et de la conduction thermique $\vec{\varphi}^{cond}$. Sachant que la convection thermique est prise en compte dans l'inertie du fluide, l'expression de $\dot{Q}$ s'écrit :

$$\dot{Q}=\int_{\Omega}P_{rod}\ d\Omega-\int_{\partial\Omega}\vec{\varphi}^{cond}\ .\ \vec{n}\ dS \tag{3.4}$$

$$\dot{Q}=\int_{\Omega}\left(P_{rod}\ d\Omega-\nabla\ .\ \vec{\varphi}^{cond}\right)\ d\Omega \tag{3.5}$$

La formulation du bilan d'énergie global (3.6) s'obtient en rassemblant les termes des équations (3.1),

(3.3) et (3.5).

$$\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t}\int_\Omega \rho\left(e+\frac{||\vec{V}||^2}{2}\right)d\Omega = \int_\Omega \left(\rho\vec{V}.\vec{g}+\nabla.\left(P\bar{\bar{I}}\,.\,\vec{V}+2\mu\bar{\bar{D}}\,.\,\vec{V}\right)+P_{rod}-\nabla\,.\,\vec{\varphi}^{cond}\right)d\Omega \tag{3.6}$$

Pour obtenir une loi locale (3.7), il suffit d'appliquer le théorème de transport de Reynolds. L'équation générale de conservation de l'énergie dans un milieu fluide exprimée en fonction de l'énergie interne $e$ (3.8) s'obtient en utilisant l'équation de Navier-Stokes pour simplifier la relation (3.7) :

$$\rho\left(\frac{\mathcal{D}e}{\mathcal{D}t}+\vec{V}\,.\,\frac{\mathcal{D}\vec{V}}{\mathcal{D}t}\right)=\rho\vec{V}.\vec{g}+\nabla.\left(P\vec{V}\right)+\nabla\,.\,\left(2\mu\bar{\bar{D}}\,.\,\vec{V}\right)+P_{rod}-\nabla\,.\,\vec{\varphi}^{cond} \tag{3.7}$$

$$\rho\frac{\mathcal{D}e}{\mathcal{D}t}=-P\nabla\,.\,\vec{V}+\bar{\bar{\tau}}\,.\,\left(\nabla\vec{V}\right)+P_{rod}-\nabla\,.\,\vec{\varphi}^{cond} \tag{3.8}$$

Dans le cas de systèmes ouverts, il est parfois plus intéressant de travailler avec l'enthalpie massique $h=e+\dfrac{P}{\rho}$, notamment si le système est isobare.

$$\begin{aligned}\frac{\mathcal{D}h}{\mathcal{D}t} &= \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t}\left(e+\frac{P}{\rho}\right)\\ &= \frac{\mathcal{D}e}{\mathcal{D}t}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathcal{D}P}{\mathcal{D}t}\boxed{-\frac{P}{\rho^2}\frac{\mathcal{D}\rho}{\mathcal{D}t}}\end{aligned}$$

L'équation de continuité permet d'écrire la relation (3.9) en simplifiant le terme encadré. L'équation du bilan d'énergie (3.10) s'obtient en combinant les relations (3.9) et (3.8).

$$\rho\frac{\mathcal{D}h}{\mathcal{D}t} = \rho\frac{\mathcal{D}e}{\mathcal{D}t}+\frac{\mathcal{D}P}{\mathcal{D}t}+P\nabla.\vec{V} \tag{3.9}$$

$$\rho\frac{\mathcal{D}h}{\mathcal{D}t} = \frac{\mathcal{D}P}{\mathcal{D}t}+\bar{\bar{\tau}}\,.\,\left(\nabla\vec{V}\right)+P_{rod}-\nabla\,.\,\vec{\varphi}^{cond} \tag{3.10}$$

À présent, l'objectif est de simplifier la relation (3.10) en réalisant l'analyse dimensionnelle de cette équation afin de mettre en évidence les termes pouvant être négligés suivant les configurations considérées.

### Analyse Dimensionnelle

L'équation du bilan d'énergie (3.10) prend en compte tous les modes de transferts thermiques. Avant de faire l'analyse dimensionnelle de cette équation complexe, des hypothèses simplificatrices ont été effectuées :

- Les termes liés au rayonnement ont été négligés.
- Les fluides suivent la loi des « gaz parfaits » de telle sorte que $\dfrac{\mathcal{D}h}{\mathcal{D}t}=C_p\dfrac{\mathcal{D}T}{\mathcal{D}t}$ où $C_p$ est la capacité thermique à pression constante.
- Puisqu'il n'y a pas de production de chaleur, $P_{rod}=0$ .
- La fonction de dissipation est notée $\phi_d=\bar{\bar{\tau}}\ :\ \nabla\vec{V}$ .
- La loi de Fourier permet d'écrire le therme de conduction thermique : $\vec{\varphi}^{cond}=-k\nabla T$ où $k$ est la

conductivité thermique et T la température.

Le théorème de Vaschy-Buckingham [32] s'applique donc à une équation simplifiée pour mener à bien l'analyse dimensionnelle :

$$\rho C_p \frac{\mathcal{D}T}{\mathcal{D}t} = \frac{\mathcal{D}P}{\mathcal{D}t} + \phi_d + \nabla\ .\ (k\nabla T) \tag{3.11}$$

Pour réaliser l'analyse dimensionnelle de l'équation (3.11), les grandeurs de référence $L_0$, $U_0$, $P_0$, $T_0$, $\rho_0$ correspondant respectivement à la longueur, la vitesse, la pression, la température et la densité de référence sont utilisées. Les variables adimensionnelles sont marquées d'un astérisque et s'écrivent comme suit :

$$\begin{aligned}
(x^*, y^*, z^*) &= \frac{(x, y, z)}{L_0} & (u^*, v^*, w^*) &= \frac{(u, v, w)}{U_0} \\
\rho^* &= \frac{\rho}{\rho_0} & t^* &= \frac{U_0 t}{L_0} \\
P^* &= \frac{P - P_0}{\rho_0 U_0^2} & T^* &= \frac{T - T_0}{T_p - T_0} \\
\bar{\bar{\tau}}^* &= \frac{\bar{\bar{\tau}}}{\mu \frac{U_0}{L_0}} & \phi_d^* &= \bar{\bar{\tau}}^* : \nabla \vec{V}\ \frac{L_0^2}{\mu U_0^2}
\end{aligned}$$

Le même procédé est appliqué aux opérateurs sans dimension de divergence, gradient et dérivée particulaire, marqués également d'un astérisque :

$$\nabla . = \frac{1}{L_0}\nabla^* . \qquad \nabla = \frac{1}{L_0}\nabla^* \qquad \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t} = \frac{U_0}{L_0}\left(\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t}\right)^*$$

Cela permet alors de formuler l'équation de l'énergie avec les variables et les opérateurs sans dimension en faisant apparaître les valeurs de référence.

$$\rho^* \rho_0 C_p (T_p - T_0) \frac{U_0}{L_0}\left(\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t}\right)^* T^* = \rho \frac{U_0^3}{L_0}\left(\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t}\right)^* P^* + \mu \frac{U_0^2}{L_0^2}\phi^* - \frac{(T_p - T_0)k_0}{L_0^2}\nabla^*\ .\ (k^*\nabla^* T^*)$$

En introduisant les nombres adimensionnels de Reynolds $Re$, Prandtl $Pr$ et Eckert $Ec$, l'équation de l'énergie peut s'écrire de la façon réduite (3.12).

$$Re = \frac{\rho_0 U_0 L_0}{\mu} \qquad Pr = \frac{\mu_0 C_p}{k} \qquad Ec = \frac{U_0^2}{C_p(T_p - T_0)}$$

$$\rho^* \left(\frac{dT}{dt}\right)^* = Ec \left(\frac{dP}{dt}\right)^* + \frac{Ec}{Re}\phi_d^* + \frac{1}{Re\ Pr}\left(k^*\nabla^* T^*\right) \tag{3.12}$$

Dans le cadre de cette étude, le nombre de Mach est petit ($M << 1$) car les vitesses considérées sont faibles face à la vitesse du son. La relation (3.13) montre que le nombre d'Eckert s'écrit en fonction du nombre de Mach. De ce fait, et étant donné les écarts de température considérés, le nombre d'Eckert est petit devant 1. Le terme du travail des forces de pression et la fonction de dissipation peuvent par

conséquent être négligés, ce qui donne l'équation modèle du bilan d'énergie (3.14).

$$Ec = \frac{(\gamma - 1)M^2}{\frac{T_p - T_0}{T_0}} \qquad M = \frac{U_0}{\sqrt{\gamma R T_0}} \tag{3.13}$$

$$\rho C_p \frac{\mathcal{D}T}{\mathcal{D}t} = \nabla.(k \nabla T) \tag{3.14}$$

### 3.1.2 Equation des espèces chimiques

Le phénomène d'évaporation est un changement d'une phase liquide en une phase gazeuse qui a lieu lorsque le liquide est en contact avec un gaz de nature chimique différente (goutte d'eau s'évaporant dans du $N_2$ par exemple). En effet, la composition chimique du gaz influence le taux d'évaporation du liquide. Lorsqu'une goutte s'évapore, le gaz, initialement monocomposant, se mélange à la vapeur d'eau qui se dégage de la goutte. C'est pour cela qu'il est nécessaire de résoudre les équations de conservation des espèces chimiques. La conservation de la masse $m_i$ pour l'espèce $i$ dans un système $\Sigma$ se traduit par la relation (3.15) [1].

$$\left.\frac{dm_i}{dt}\right|_{\Sigma} = \int_{\Omega} \dot{m}_i''' d\Omega \tag{3.15}$$

L'intégrale de $\dot{m}_i'''$ (3.15), correspond à la perte ou au gain de masse de l'espèce $i$ dans le cas de réactions chimiques. Dans le cadre de cette étude, il n'y a pas de réactions chimiques, ce terme est donc nul. Du développement de l'équation (3.15), découle la relation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{dm_i}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_{\Omega} \rho_i \, d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} \rho_i \left( \vec{V}_i \, . \, \vec{n} \right) dS \end{aligned} \tag{3.16}$$

La vitesse $V_i$ correspond à la vitesse de l'espèce $i$ qui est inconnue. Pour exprimer cette variable en fonction des autres inconnues du système, il faut transformer (3.16). En utilisant le vecteur flux diffusif de masse $\vec{J}_i$, l'intégrale surfacique s'écrit :

$$\int_{\partial\Omega} \rho_i \left( \vec{V}_i \, . \, \vec{n} \right) dS = \int_{\partial\Omega} \rho_i \left( \vec{V} \, . \, \vec{n} \right) dS + \int_{\partial\Omega} \vec{J}_i \, . \, \vec{n} dS \tag{3.17}$$

La densité $\rho$ est égale à la somme des densités de chacun des composants [2]. En introduisant la fraction massique [3] $Y_i$ de l'espèce i et en appliquant la loi de Fick, l'équation intégrale de conservation de l'espèce

1. L'opérateur de dérivée totale appliqué à une fonction $A(\vec{x}, t)$ qui dépend de la position $\vec{x}$ et du temps $t$ donne $\frac{d}{dt}A = \frac{\partial}{\partial t}A + \nabla.\left(\vec{V}.A\right)$

2. $\rho = \sum_{i=1}^{N} \rho_i$

3. $Y_i = \frac{\rho_i}{\rho}$

$i$ se formule comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{\Omega}\rho Y_i d\Omega + \int_{\partial\Omega}\rho Y_i\left(\ \vec{V}\ .\ \vec{n}\ \right)dS = \int_{\partial\Omega}\rho\ D_m\ \nabla Y_i dS \tag{3.18}$$

Où $D_m$ est le coefficient de diffusion massique. L'application du théorème de Reynolds permet de reformuler l'équation locale de conservation des espèces :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho Y_i\right) + \nabla.\left(\rho Y_i\vec{V}\right) = \nabla.\left(\rho D_m \nabla Y_i\right) \tag{3.19}$$

Cette équation peut s'écrire sous forme non conservative. C'est sous cette forme analogue que l'équation de conservation des espèces sera utilisée par la suite :

$$\rho\frac{\partial}{\partial t}\left(Y_i\right) + \rho\left(\vec{V}.\nabla\right)Y_i = \nabla.\left(\rho D_m \nabla Y_i\right) \tag{3.20}$$

### 3.1.3 Relation thermodynamique et conditions de saut

Dans le cas des écoulements multiphasiques, il est important de connaitre le comportement des variables à l'interface, i. e. leur valeur sur celle-ci ou les éventuelles conditions de saut. Ce paragraphe permet de poser les différentes conditions de saut à prendre en compte lors de la résolution des équations ainsi que les valeurs de certaines variables à l'interface.

**Valeurs de la fraction massique et de la température à l'interface :**

La fraction massique $Y_1$ de l'espèce $l_1$ n'est calculée que dans le gaz car le liquide est considéré comme monocomposant. L'objectif est donc de connaitre la valeur de $Y_1$ à l'interface côté gaz. Pour un mélange $l_1 + air$, $Y_1$ s'écrit :

$$Y_1 = \frac{n_1\ \ M_1}{n_1\ \ M_1 + n_{air}\ \ M_{air}} \tag{3.21}$$

Où $n_1$ et $n_{air}$ sont les nombres de moles de $l_1$ et de l'air et $M_1$ et $M_{air}$ leurs masses molaires respectives. L'air et la vapeur de $l_1$ suivent la loi des « gaz parfaits ». Les pressions partielles associées à chaque composant du gaz sont données dans (3.22) et (3.23) en fonction du volume $\mathcal{V}$, de la constante universelle des gaz parfaits $\mathcal{R}$ et de la température $T$.

$$P_1 = \frac{n_1\ \mathcal{R}\ T}{\mathcal{V}} \tag{3.22}$$

$$P_{air} = \frac{n_{air}\ \mathcal{R}\ T}{\mathcal{V}} \tag{3.23}$$

La relation (3.21) peut se reformuler en fonction des pressions partielles $P_1$ et $P_{air}$ de chacune des espèces (3.24).

$$Y_1 = \frac{P_1\ \ M_1}{P_1\ \ M_1 + P_{air}\ \ M_{air}} \tag{3.24}$$

La loi de Dalton (3.25) énonce que la pression totale $P$ d'un gaz est égale à la somme des pressions partielles de chacune des espèces qui le constituent. Elle peut être appliquée ici puisque les espèces

gazeuses suivent la loi des « gaz parfaits ». De cette relation découle la formulation finale de la fraction massique à l'interface (3.26) :

$$P = P_1 + P_{air} \tag{3.25}$$

$$Y_1 = \frac{P_1 \quad M_1}{P_1 \quad M_1 + (P - P_1) \quad M_{air}} \tag{3.26}$$

Le système étant supposé isobare et ouvert : il ne reste plus qu'à calculer la pression partielle $P_1$. La relation de Clausius-Clapeyron (3.27) permet de calculer la pression d'équilibre à l'interface au cours d'un changement de phase du corps pur $l_1$ :

$$P_1^{\Gamma} = P_{atm} e^{-\frac{h_{lg} m_1}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T^{\Gamma}} - \frac{1}{T^B}\right)} \tag{3.27}$$

Dans (3.27), $P_{atm}$ est la pression atmosphérique, $h_{lg}$ la chaleur latente de vaporisation de l'espèce $l_1$ à la pression atmosphérique, $T^{\Gamma}$ est la température à l'interface et $T^B$ la température d'ébullition de l'espèce $l_1$.

Dans le cas de l'ébullition, la température est ici considérée comme étant continue à l'interface et égale à la température de saturation à la pression atmosphérique. La continuité des températures à l'interface découle du second principe de la thermodynamique (condition de saut sur l'entropie). Cependant, si P est discontinue à l'interface, cela peut générer des corrections qui généralement sont faibles.

Ainsi, *Juric et Tryggvason* montrent dans [54] que si un liquide est en ébullition et que le saut de pression à l'interface est non nul les températures sont différentes de part et d'autre de l'interface puisque la température de saturation dépend de la pression :

$$(P_g \neq P_l) \quad \Rightarrow \quad \left(T_l^{sat}(P_l) \neq T_g^{sat}(P_g)\right)$$

Où $P_g$ est la pression du gaz, $P_l$ celle du liquide, et $T_i^{sat}(P_i)$ la température de saturation de l'espèce $i$ à la pression $P_i$.

### Conditions de saut à l'interface

Pour calculer les conditions de saut à travers l'interface notée $\Gamma$, il faut utiliser les relations de Rankine-Hugoniot pour l'équation de continuité (3.28) [29] :

$$\left[\rho(\vec{V}.\vec{n} - D)\right]_{\Gamma} = 0 \tag{3.28}$$

$$\rho_l(V_n|_l - D) = \rho_g(V_n|_g - D) \tag{3.29}$$

L'opérateur $[\ .\ ]_{\Gamma}$ quantifie le saut à travers l'interface $[A]_{\Gamma} = A_l - A_g$. La vitesse de l'interface est noté $\vec{W} = D\vec{n}$ où D est la valeur de la norme de $\vec{W}$ et $\vec{n}$ la normale entrante dans le liquide. Cette norme s'exprime en fonction de la vitesse normale $V_n = \vec{V}\ .\ \vec{n}$ dans le liquide et de la vitesse de vaporisation $S$ du liquide : $D = (V_n)_l + S$. Le débit de réaction $\dot{\omega}$ peut s'écrire en fonction de la vitesse de vaporisation du liquide :

$$\dot{\omega} = \rho_l S \tag{3.30}$$

En présence de changement de phase, les vitesses ne sont pas continues à l'interface. Le débit massique de liquide vaporisé est égal au débit de vapeur qui se dégage de la goutte, soit $\dot{\omega}$ [96]. La relation suivante découle de cette condition :

$$-\dot{\omega} = \rho_l(V_n|_l - D) = \rho_g(V_n|_g - D) \tag{3.31}$$

Ce qui permet de déduire, en utilisant (3.29) une autre écriture du débit de réaction :

$$\begin{aligned}
&-\dot{\omega} = \rho_g(V_n|_g - V_n|_l - S) \\
\Rightarrow \quad &-\dot{\omega} + \rho_g S = -\rho_g[V]_\Gamma \ \vec{n} \\
\Rightarrow \quad &-\frac{\dot{\omega}}{\rho_g} + S = -[V]_\Gamma \ \vec{n} \\
\Rightarrow \quad &-\frac{\dot{\omega}}{\rho_g} + \frac{\dot{\omega}}{\rho_l} = -[V]_\Gamma \ \vec{n} \\
\Rightarrow \quad &[V]_\Gamma = -\left[\frac{1}{\rho}\right]_\Gamma \dot{\omega} \ \vec{n}
\end{aligned} \tag{3.32}$$

L'écriture de la relation de Rankine-Hugoniot correspondant à l'équation de l'énergie (3.33) [29, 30] permet de calculer la condition de saut sur le gradient de température.

$$\left[\left(\rho e + \frac{\rho\left(\vec{V}.\vec{n} - D\right)^2}{2} + P\right)\left(\vec{V}.\vec{n} - D\right)\right]_\Gamma = [k\nabla T.\vec{n}]_\Gamma \tag{3.33}$$

Puisque le saut d'une somme est égale à la somme des sauts à l'interface, la condition de saut sur l'énergie (3.33) s'écrit :

$$[k\nabla T.\vec{n}]_\Gamma = \underbrace{\left[\rho e \ \left(\vec{V}.\vec{n} - D\right)\right]_\Gamma}_{A} + \underbrace{\left[\frac{\rho\left(\vec{V}.\vec{n} - D\right)^3}{2}\right]_\Gamma}_{B} + \underbrace{\left[P\left(\vec{V}.\vec{n} - D\right)\right]_\Gamma}_{C} \tag{3.34}$$

D'après (3.28) la vitesse de réaction s'exprime en fonction des vitesse et des densités de part et d'autre de l'interface :

$$S = -\frac{\rho_g\left((\vec{V}.\vec{n})_g - D\right)}{\rho_l} \tag{3.35}$$

L'objectif à présent est d'écrire les différents termes en fonction de la vitesse de réaction $S$. Le

développement du terme A donne la relation suivante :

$$\begin{aligned} A &= \rho_l\ e_l\ \left((\vec{V}.\vec{n})_l - D\right) - \rho_g\ e_g\ \left((\vec{V}.\vec{n})_g - D\right) \\ &= -\rho_l\ e_l\ S + \rho_l\ e_g\ S \\ &= -\rho_l\ S\ [e]_\Gamma \end{aligned} \tag{3.36}$$

De la même façon, le développement du terme C permet d'exprimer cette condition de saut en fonction de $S$ :

$$\begin{aligned} C &= P_l\left((\vec{V}.\vec{n})_l - D\right) - P_g\left((\vec{V}.\vec{n})_g - D\right) \\ &= -SP_l + P_g\frac{\rho_l S}{\rho_g} \\ &= -\rho_l\ S\frac{P_l}{\rho_l} + \rho_l S\frac{P_g}{\rho_g} \\ &= -\rho_l\ S\ \left[\frac{P}{\rho}\right]_\Gamma \end{aligned} \tag{3.37}$$

Finalement, le développement du terme B s'écrit :

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{2}\left(\rho_l\left((\vec{V}.\vec{N})_l - D\right)^3 - \rho_g\left((\vec{V}.\vec{N})_g - D\right)^3\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(-\rho_l S^3 + \frac{\rho_l^3 S^3}{\rho_g^2}\right) \\ &= -\frac{\rho_l^3\ S^3}{2}\left[\frac{1}{\rho^2}\right]_\Gamma \end{aligned} \tag{3.38}$$

L'équation (3.33) peut s'écrire de la façon suivante :

$$[k\nabla T.\vec{n}]_\Gamma = -\rho_l\ S\left(\left[e + \frac{P}{\rho}\right]_\Gamma + \frac{\rho_l^2\ S^2}{2}\left[\frac{1}{\rho^2}\right]_\Gamma\right) \tag{3.39}$$

Cette expression (3.39) peut s'exprimer en fonction de l'enthalpie par unité de masse $h = e + \dfrac{P}{\rho} = h_0 + c_p(T - T_0)$, où $h_0$ est l'enthalpie par unité de masse à une température de réference $T_0$.

$$[k\nabla T.\vec{n}]_\Gamma = -\rho_l\ S\left([h_0]_\Gamma + [C_p]_\Gamma(T^\Gamma - T_0) + \frac{\rho_l^2\ S^2}{2}\left[\frac{1}{\rho^2}\right]_\Gamma\right) \tag{3.40}$$

La température de référence peut être choisie égale à la température de saturation du liquide $T_0 = T_l^{sat}$. Dans le cas de l'ébullition, le terme $[C_p]_\Gamma(T^\Gamma - T_0)$ est nul puisque $T^\Gamma = T_l^{sat}$. Ce n'est pas le cas de l'évaporation, bien que ce terme soit négligeable pour l'eau.

En effet, dans cette thèse sont principalement étudiés les cas de vaporisation de gouttes d'eau dans l'air et dans ces configurations :

$$\left.\begin{array}{r} [C_p]_\Gamma \sim 10^3 \\ \\ (T_0 - T^\Gamma) \sim 10^2 \end{array}\right\} \Rightarrow [C_p]_\Gamma (T_0 - T^\Gamma) \sim 10^5$$

De plus, le saut de chaleur latente de vaporisation de l'eau $[h_0]_\Gamma \sim 10^6$. Ainsi, même dans le cas de l'évaporation, il est possible de négliger le terme en $[C_p]_\Gamma (T_0 - T^\Gamma)$. De plus, dans le cas des simulations du phénomène de Leidenfrost :

$$\left.\begin{array}{r} S \sim 10^{-2} \\ \\ \left[\frac{1}{\rho}\right] \sim 1 \\ \\ \rho_g \sim 1 \end{array}\right\} \Rightarrow \frac{\rho_g^2 \, S^2}{2} \left[\frac{1}{\rho^2}\right]_\Gamma \sim 10^{-4}$$

En notant $h_{lg}$ la chaleur latente de vaporisation ($h_{lg} = -[h_0]_\Gamma$) et $\dot{\omega} = \rho_l \, S$ le taux de vaporisation, le saut du flux de température s'écrit finalement :

$$[k \nabla T . \vec{n}]_\Gamma = \dot{\omega} \, h_{lg} \tag{3.41}$$

Finalement, il faut calculer le saut du flux de fraction massique à l'interface. Comme pour calculer le saut de flux de température, il faut d'abord écrire la relation de Rankine-Hugoniot pour l'équation de conservation de la fraction massique :

$$\left[\rho Y \left(\vec{V} . \vec{n} - D\right)\right]_\Gamma = [\rho D_m \nabla Y]_\Gamma \tag{3.42}$$

De la même manière que pour la température, en utilisant (3.35), la relation (3.42) est simplifiée :

$$[\rho D_m \nabla Y]_\Gamma = -\rho_l S [Y]_\Gamma \tag{3.43}$$

$$[\rho D_m \nabla Y]_\Gamma = -\dot{\omega} [Y]_\Gamma \tag{3.44}$$

## 3.2 Algorithme de résolution des équations de l'énergie et des espèces chimiques

Même si de nombreux développements numériques pour les simulations des changements de phase et en particulier du régime d'ébullition ont été effectués, la simulation numérique directe de ce phénomène reste un challenge. *Son et Dhir* [90] et *Juric et Tryggvason* [54] ont été pionniers en la matière avec des

méthodes numériques spécialement adaptées au régime d'ébullition. Ces approches sont utilisées avec des méthodes de suivi d'interface de type Level Set et Front tracking respectivement. Dans [106], *Welch et Wilson* développent une méthode numérique pour l'ébullition avec un suivi d'interface de type VOF.

*Jamet et al.* [51] utilisent la méthode « Second Gradient Method » pour décrire les écoulements en présence d'ébullition. Cette méthode permet de considérer l'interface liquide/vapeur comme un domaine continu « fin » dans lequel les variations des propriétés des fluides $(\rho, \mu...)$ sont drastiques mais elles sont continues. Dans [107], des développements permettant de prendre en compte de grands rapports de densité sont effectués par *Ye et al.* avec une méthode de type « Sharp-Interface Marker Points Method ».

Une méthodologie générale est présentée par *Esmaeeli et Tryggvason* dans [24, 22, 23] pour des simulation numériques 3D dans des géométries complexes. Des développements pour l'ébullition avec une méthode couplée VOF/Level Set pour le suivi de l'interface sont présentés dans [99] (*Tomar et al.*). Une nouvelle approche avec un modèle de sous-maille dans la couche limite est proposée par *Ge et Fan* dans [27, 28] pour des impact de gouttes en régime d'ébullition sur une paroi.

Finalement, des développements numériques 3D pour l'ébullition nucléee sur une surface plate horizontale et pour l'ébullition d'un film dans un cylindre horizontal sont présentés dans [92, 91] par *Son et Dhir*. Dans [29], *Gibou et al.* utilisent une méthode Ghost Fluid pour élaborer une « Sharp Interface Method »afin de modéliser les écoulements en presence d'ébullition. Cette méthode est implémentée dans le code $\mathcal{DIVA}$ et sera présentée plus en détails dans la première partie de ce chapitre.

En revanche, très peu de développements numériques ont été effectués pour modéliser l'évaporation dans un écoulement diphasique avec des interfaces mobiles. *Tanguy et al.* proposent une simulation numérique directe de l'évaporation en utilisant la fraction massique pour calculer le flux massique de vaporisation. L'équilibre thermodynamique local étant supposé, la température est continue à l'interface mais pas le saut de son gradient qui dépend du flux massique de vaporisation. La méthode Level Set pour le suivi de l'interface est utilisée. Cet algorithme est implémenté dans le code $\mathcal{DIVA}$ et sera présenté dans cette partie. Il permet de modéliser les phénomènes exclusivement liés à l'évaporation.

D'autres méthodes ont été développées par la suite : par exemple, *Hardt et Wondra* [39] considèrent que l'évaporation conduit à rajouter un terme source dans l'équation de l'énergie. Ce terme source est estimé avec la loi de Schrage pour des petites déviations de l'équilibre thermodynamique local et les auteurs supposent donc que la température est discontinue à l'interface. Ils utilisent la méthode VOF pour capturer l'interface mais précisent que leur approche est indépendante des méthodes de suivi d'interface.

Dans la même année, *Schlottke et Weigand* [86] ont effectué des développements pour des écoulements 3D incompressibles en présence d'évaporation avec la méthode VOF où le flux de vaporisation est calculé à partir de la fraction massique dans les mailles traversées par l'interface.

En 2012, *Houim et Kuo* [49] ont étudié l'évaporation pour des écoulements compressibles et réactifs avec une méthode level set pour le suivi de l'interface. Un problème modifié de Riemann est résolu de manière exacte à l'interface pour prendre en compte le saut des vitesses et de pression. Le flux massique d'évaporation est calculé à partir de la loi de Schrage ce qui implique que le saut de température à l'interface est différent de zéro.

Finalement, *Ma et Bothe* [64] ont étudié le phénomène de Marangoni et son intéraction avec l'évaporation. Ils résolvent séparément le champ de température dans les deux phases. En supposant que l'équilibre thermodynamique local est respecté, le flux massique d'évaporation dépend du saut de gradient de température. Cela suppose de connaitre la température à l'interface qui est estimée en utilisant la pression de saturation.

Dans un autre registre, *Duret et al.* [21] effectuent des simulations numériques directes d'écoulements

diphasiques en régime turbulent en considérant des conditions de faible évaporation et de température uniforme dans la phase liquide. Les auteur focalisent leur étude sur le mélange turbulent de l'espèce évaporée.

Cette partie a pour objectif de décrire les algorithmes permettant de modéliser les régimes d'ébullition et d'évaporation implémentés dans le code $\mathcal{DIVA}$. Le premier algorithme [29] permet de modéliser les phénomènes exclusivements liés à l'ébullition tels que la formation de bulles de vapeur dans un film d'eau sur une surface chaude par exemple. Cet algorithme résout la température dans le liquide et dans le gaz de manière indépendante en imposant une condition de Dirichlet constante à l'interface et égale à la température d'ébullition du liquide. Le calcul du taux de vaporisation est ensuite effectué en évaluant le saut du gradient de température puis en utilisant la relation qui les lie (3.41).

Le deuxième algorithme [96] permet de modéliser le phénomène d'évaporation d'une goutte d'eau dans l'air par exemple. Comme cela a été signalé dans l'introduction, cette méthode diffère de l'algorithme d'ébullition dans le sens où la température n'est pas imposée à l'interface. Le champ de température est résolu simultanément dans le gaz et le liquide en imposant une condition de saut à l'interface sur son gradient. La valeur du saut du gradient de température est évaluée en calculant le taux de vaporisation à partir de la fraction massique. Cette dernière est calculée en résolvant l'équation de conservation des espèces chimiques avec une condition de Dirichlet à l'interface.

Bien que l'algorithme de *Tanguy et al.* donne des résultats très satisfaisants sur les phénomènes liés à l'évaporation, lorsque la fraction massique tend vers 1 autour de la goutte (i. e. lorsque le gaz environnant tend vers un état de saturation) la relation utilisée pour calculer le taux de vaporisation tend vers une indétermination de type 0/0 ce qui génère des erreurs numériques. Pour y remédier, un nouvel algorithme permettant de prendre en compte la transition entre le régime d'ébullition et d'évaporation est présentée dans cette partie.

A la connaissance des auteurs, ce nouvel algorithme est le premier à pouvoir traiter globalement la vaporisation d'un liquide. Il s'inspire de la méthode de *Gibou et al.* [29] en calculant la température dans le gaz et dans le liquide de façon indépendante tout en imposant une condition de Dirichlet à l'interface. En revanche, la température interfaciale n'est pas supposé constante : elle dépend de la fraction massique à l'interface. Le taux d'évaporation est ensuite calculé grâce à la relation qui le lie au saut du gradient de température ce qui permet de lever l'indétermination. Enfin, l'équation de conservation des espèces avec une condition de Robin à l'interface qui dépend du taux de vaporisation est résolue afin de calculer le champ de fraction massique.

### 3.2.1 Solveur thermique pour l'ébullition (GFTSB)

L'ébullition est un phénomène de changement de phase d'un liquide pur dans une vapeur saturée. Il se produit lorsqu'un liquide est chauffé jusqu'à la température critique « d'ébullition » ou si il subit une dépression (cavitation). La méthode numérique présentée par la suite permet de modéliser les écoulements diphasiques en présence de changement de phase dans le régime d'ébullition. Elle sera appelée « Ghost Fluid Thermal Solver for Boiling »(GFTSB) au cours de cette thèse et pour de plus amples détails se référer à [29].

Dans le cas de l'ébullition, la température dans le liquide et dans le gaz est résolue de manière indépendante [29]. La première étape de cet algorithme consiste donc à résoudre la température à l'intérieur du liquide en imposant une condition de Dirichlet à l'interface. Cette condition est connue et constante puisque le liquide est supposé en régime d'ébullition, de ce fait : $T_l^\Gamma = T^B$ où $T^B$ est la température

d'ébullition du liquide. Comme l'équilibre thermodynamique est supposé, la deuxième loi de la thermodynamique impose la continuité de la température à l'interface. Ainsi, la température à l'intérieur du gaz $T_g$ est résolue en imposant la même condition de Dirichlet constante $T_g^\Gamma = T^B$. On a donc :

$$\rho_l C_{p_l} T_l^{n+1} - \Delta t\ \nabla.\left(k_l \nabla T_l^{n+1}\right) = \rho_l C_{p_l} T_l^n - \Delta t\ \rho_l C_{p_l}(\vec{V}_l.\nabla) T_l^n \quad \text{si} \quad \phi \geqslant 0 \tag{3.45}$$

$$\rho_g C_{p_g} T_g^{n+1} - \Delta t\ \nabla.\left(k_g \nabla T_g^{n+1}\right) = \rho_g C_{p_g} T_g^n - \Delta t\ \rho_g C_{p_g}(\vec{V}_g.\nabla) T_g^n \quad \text{si} \quad \phi < 0 \tag{3.46}$$

Afin d'effectuer la discrétisation spatiale de l'équation (3.45) pour le liquide et pour le gaz, la méthode de discrétisation de l'équation de l'énergie avec une condition de Dirichlet à l'interface dans un domaine irrégulier développée par *Gibou et al.* [30] est utilisée. Cette méthode est détaillée dans la partie 3.3.1 et permet, comme son nom l'indique, de générer un champ de température dans un domaine quelque soit la forme des frontières.

Une fois la température connue, l'objectif est à présent de calculer le taux de vaporisation puisque le changement de phase influence le mouvement de l'interface par l'intermédiaire de cette valeur et qu'il caractérise les échanges entre le liquide et le gaz. En utilisant la condition de saut (3.41), il est possible de le calculer :

$$\dot{\omega} = \frac{[k\nabla T\ .\ \vec{n}]_\Gamma}{h_{lg}} \tag{3.47}$$

$$\Rightarrow \dot{\omega} = \frac{\left(k^l \nabla T^l - k^g \nabla T^g\right)\ .\ \vec{n}}{h_{lg}} \tag{3.48}$$

La valeur du débit de réaction n'a de signification physique qu'à l'interface entre le liquide et le gaz puisque les échanges se font à cet endroit, elle est donc nulle ailleurs. Cependant, la méthode de capture d'interface utilisée (méthode Level Set) suppose de calculer les variables dans un maillage fixe qui ne suit pas l'interface. C'est pourquoi la définition du taux de vaporisation est étendue dans son voisinage.

$$\dot{\omega}_{i,j} = \frac{\left(k^l \nabla T^l\big|_{i,j} - k^g \nabla T^g\big|_{i,j}\right)\ .\ \vec{n}_{i,j}}{h_{lg}} \tag{3.49}$$

L'équation (3.49) fait intervenir le gradient thermique de part et d'autre de l'interface. La discrétisation spatiale du gradient d'une valeur suppose l'utilisation d'un champ continu au voisinage du point d'évaluation. Or à l'issue de l'étape 1, le champ $T_l$ est connu à l'intérieur du liquide mais les valeurs dans la partie gazeuse ne sont pas calculées. C'est en introduisant les variables $T_l^G$ et $T_g^G$ qui représentent le champ de température réel dans le liquide et son extension dans le gaz d'une part et le champ de température réel dans le gaz et son extension dans le liquide d'autre part que le problème est levé.

La méthode d'extension d'*Aslam* [2] permet d'obtenir un champ régulier $T_l^G$ de ce type dont les valeurs dans le liquide restent les mêmes que celles qui ont été calculées précedemment. Cette méthode qui est présentée dans la partie 3.4.1 a été implémentée dans le code $\mathcal{DIVA}$ et intensivement validée à l'aide d'un cas test théorique [97].

Cet algorithme ne peut être utilisé dans le cas de l'évaporation où la température à l'interface entre le liquide et le gaz n'est pas connue. *Tanguy et al.* [96], proposent une méthode de modélisation de l'évaporation dans un écoulement diphasique qui est développée dans la partie suivante.

### 3.2.2 Solveur thermique pour l'évaporation (GFTSE)

Le phénomène d'évaporation a lieu lorsqu'un liquide entre en contact avec un gaz de nature chimique différente, quelque soient les conditions de température et de pression du système. Pour modéliser ce phénomène, l'algorithme exposé précédemment ne peut être utilisé car il suppose la température connue et constante à l'interface.

Pour connaitre la thermodynamique de l'écoulement, il faut donc calculer le taux de fraction massique de manière différente et c'est en partant de ce constat que *Tanguy et al.* [96] ont développé un nouvel algorithme permettant de modéliser les changements de phase dans un régime d'évaporation. Cet algorithme sera appelé « Ghost Fluid Thermal Solver for Evaporation »(GFTSE) au cours de cette thèse.

La relation (3.44) lie ce taux de vaporisation $\dot{\omega}$ au saut du gradient de fraction massique $Y$ à l'interface : donc, si le champ de $Y$ est connu, il est possible de calculer $\dot{\omega}$. L'évolution temporelle et spatiale de la fraction massique est donnée par la relation de conservation des espèces chimiques (3.20). Pour calculer le champ de $Y$, il faut également connaitre la fraction massique à l'interface liquide/gaz donnée par les relations (3.26) et (3.27) issue des relations de Clausius Clapeyron. Ainsi, grâce à l'algorithme de *Gibou et al.* [30] la fraction massique est calculée dans le gaz avec une condition de Dirichlet à l'interface.

Même si l'évaporation se produit quelque soit la température, cette dernière a une grande influence sur le phénomène : l'évolution de la température et de la fraction massique de vapeur sont donc fortement couplés. En effet, les relation (3.26) et (3.27) font intervenir la température à l'interface et il est donc indispensable de la calculer.

Ainsi, contrairement à la méthode GFTSB [4], la température est résolue simultanément dans le gaz et le liquide avec la relation (3.14) en imposant une condition de saut sur le flux thermique (3.41) (qui cette fois, est connu).

En résumé, les étapes de l'algorithme « Ghost Fluid Thermal Solver for Evaporation »sont les suivantes (pour plus d'informations, se référer à [96]) :

1. Dans un premier temps, l'équation des espèces dans le gaz (3.20) est résolue avec une condition de Dirichlet à l'interface issue de la relation de Clausius-Clapeyron (3.26) et (3.27). Avec la méthode d'Euler la discrétisation temporelle s'écrit :

$$\rho Y^{n+1} - \Delta t\ \nabla.\left(\rho D_m \nabla Y^{n+1}\right) = \rho Y^n - \Delta t\left(\vec{V}.\nabla\right) Y^n \tag{3.50}$$

   La méthode de discrétisation donnée dans la partie 3.3.1 [30] permet de calculer des équations de conservation dans des domaines irréguliers avec une condition de Dirichlet aux bords. Cette condition est calculée avec la relation (3.26) :

$$Y^{\Gamma}_{vap} = \frac{P^{\Gamma}_{vap}\ m_{vap}}{(P_{atm} - P^{\Gamma}_{vap})m_g + P^{\Gamma}_{vap}\ m_{vap}} \tag{3.51}$$

   L'équation de Clausius-Clapeyron (3.27) permet d'estimer $P^{\Gamma}$, la pression de la vapeur saturée sur l'interface.

$$P^{\Gamma} = P_{atm} e^{-\frac{h_{lg} m_{vap}}{\mathcal{R}}\left(\frac{1}{T^{\Gamma}} - \frac{1}{T^{B}}\right)} \tag{3.52}$$

   Cette formule montre comment l'equation de conservation de la fraction massique est couplée à

4. Ghost Fluid Thermal Solver for Boiling

celle de l'énergie. Pour calculer $Y^\Gamma$ il faut donc connaitre la température à l'interface, qui sera estimée à partir du champ de température T au temps $t_n$ [5].

2. La condition de saut du flux de fraction massique, permet de calculer le débit de réaction. Le débit $\dot{\omega}$ s'écrit :

$$\dot{\omega} = \frac{-\left[\rho D_m \nabla Y.\vec{n}\right]_\Gamma}{Y_l^\Gamma - Y_{vap}^\Gamma} \tag{3.53}$$

Le liquide est pur par hypothèse, la fraction massique est donc connue dans le liquide et vaut 1, ce qui permet de simplifier (3.53) :

$$\dot{\omega} = \frac{\rho^g D_m \nabla Y^g.\vec{n}|_\Gamma}{1 - Y_{vap}^\Gamma} \tag{3.54}$$

Afin de calculer le gradient de $Y^g$ dans les mailles proches de l'interface, une extension du champ de $Y^g$ avec la méthode développée par *T. Aslam* [2] (*cf* 3.4.1) est effectuée.

$$\dot{\omega}_{i,j} = \frac{\rho^g_{i,j} D_m \ \nabla Y^g.\vec{n}|_{i,j}}{1 - Y_{i,j}} \tag{3.55}$$

où $Y_{i,j}$ est la fraction massique au point $(x(i), y(j))$ si le point est dans le gaz ou la valeur de l'extension de $Y^g$ sur le même point sinon. Le débit de réaction n'est défini qu'à l'interface, mais il sera calculé au voisinage de celle ci.

3. Il est nécessaire à présent de calculer le champ de température dans le domaine. Pour cela la discrétisation temporelle (3.45) est utilisée. Cette fois, le champ de température $T$ est résolu simultanément dans le liquide et le gaz en respectant la condition de saut (3.41) à l'interface. La méthode de *Liu et al.* dans [61] est utilisée à cette fin. Cette méthode est détaillée dans le chapitre 2, partie 2.5.

Cet algorithme permet de modéliser les écoulement en régime d'évaporation pure. Cependant, lorsque la température du liquide à l'interface se rapproche de la température d'ébullition, la vapeur se sature au voisinage de l'interface et la fraction massique tend vers 1. Par conséquent, si le gradient de fraction massique tend vers 0, dans la relation (3.54) le numérateur et le dénominateur du rapport tendent tout deux vers 0. Ceci conduit à une indétermination de type 0/0 du taux de vaporisation $\dot{\omega}$ et le calcul diverge.

Ainsi, lorsque le liquide qui se vaporise tend vers un régime d'ébullition, l'algorithme n'est plus en mesure de fournir des résultats satisafaisants. Les premières simulations de l'effet Leidenfrost ont été réalisées avec le solveur thermique pour l'évaporation GFTSE, qui a été implémenté dans le code de calcul $\mathcal{DIVA}$. Ces simulations ont montré que lors du rebond de la goutte, la température à l'interface atteint par endroits la température d'ébullition du liquide.

Puisque pendant l'impact d'une goutte d'eau sur une paroi chaude le liquide n'est pas uniquement en régime d'évaporation, il est necessaire d'utiliser un algorithme permettant de prendre en compte la transition d'un régime d'évaporation à un régime d'ébullition. Comme à la connaissance des auteurs un tel algorithme n'existe pas dans la littérature, l'un des principaux résultat de cette thèse a été de le développer.

5. $t_n = \sum_{i=1}^{n} \Delta t_i$

### 3.2.3 Solveur thermique pour l'évaporation et l'ébullition (GFTSEB)

Lorsqu'une goutte impacte une paroi en régime Leidenfrost, elle atteint rapidement la température d'ébullition sur la partie de la surface qui fait face à la paroi mais reste en régime d'évaporation sur le dessus. De ce fait, imposer une condition de température uniforme sur l'interface impliquerait une surchauffe sur le dessus de la goutte (l'utilisation de l'algorithme GFTSB est donc proscrite dans ce cas) et l'utilisation de l'algorithme d'évaporation pure GFTSE aboutit à la divergence du calcul.

La méthode de résolution décrite dans ce paragraphe a été mise en place et testée dans le cadre de cette thèse. Elle permet de modéliser un écoulement diphasique avec des interfaces réactives en régime d'ébullition et/ou d'évaporation. Dans cette thèse, cette méthode sera appelée « Ghost Fluid Thermal Solver for Evaporation and Boiling » (GFTSEB).

Le solveur GFTSEB s'inspire de la méthode utilisée pour modéliser l'ébullition (GFTSB) dans le sens où la température est résolue de manière indépendante dans le liquide et dans le gaz et le taux de vaporisation est calculé à partir du saut du gradient de température. Cependant, il y a un enjeu supplémentaire : déterminer la température à l'interface puisqu'elle n'est pas uniforme dans ce cas et c'est en s'inspirant de la méthode GFTSE développée par *Tanguy et al.* que l'on va pouvoir la calculer.

Lorsque l'écoulement est en régime de transition évaporation/ébullition, la reformulation de la condition de saut sur la fraction massique permet de lever l'indétermination exposée précédemment :

$$\dot{\omega}\ Y_{vap}^{\Gamma} + \rho^g D_m \nabla Y^g . \vec{n}|_{\Gamma} = \dot{\omega} \tag{3.56}$$

En effet, lorsque l'on passe d'un régime d'évaporation à un régime d'ébulition, $Y_{vap}^{\Gamma} \longrightarrow 1$ et $\nabla Y^g \longrightarrow 0$ de telle sorte que dans le cas de l'ébullition l'équation devient $\dot{\omega} = \dot{\omega}$ et l'indetermination est levée. De cette manière, la transition entre l'évaporation et l'ébullition se fait naturellement sans que le calcul ne diverge.

Ce type de condition limite ne porte pas sur la valeur de $Y$ à l'interface (condition de Dirichlet) ni celle de son gradient (Condition de Neuman). Il s'agit en réalité d'une relation linéaire entre la valeur de $Y$ et celle de son gradient. La condition (3.56) est appelée « condition de Robin ».

Pour prendre en compte une telle condition aux limites, un algorithme spécifique a été implémenté dans le code $\mathcal{DIVA}$. Cet algorithme a été développé par *Papac et al.* dans [77] et permet de calculer une équation d'évolution spatio-temporelle de type équation de la chaleur dans un domaine irrégulier avec des conditions aux limites de Robin.

La résolution de l'évolution de la fraction massique avec la condition à l'interface (3.56) de type Robin suppose que le taux de vaporisation soit connu. Il est possible de le calculer à partir du saut de gradient de température à l'interface comme pour la méthode GFTSB. Pour ce faire, le champ de température est résolu de manière indépendante dans le gaz et dans le liquide en imposant une condition de Dirichlet à l'interface.

Dans le cas présent, la température à l'interface peut ne pas être constante elle peut être calculée

grâce à la relation de Clausius Clapeyron (3.26) et (3.27) est effectuée :

$$P_{vap}^{\Gamma} = \frac{-Y_{vap}^{\Gamma} P_{atm} m_g}{(m_{vap} - m_g) Y_{vap}^{\Gamma} - m_{vap}} \tag{3.57}$$

$$T^{\Gamma} = \frac{h_{lg}\ m_{vap}\ T^B}{h_{lg}\ m_{vap} - \mathcal{R}\ T^B\ ln(\frac{P_{vap}^{\Gamma}}{P_{atm}})} \tag{3.58}$$

En résumé, ce nouvel algorithme permet de résoudre le régime de transition entre l'évaporation et l'ébullition. Pour cela, la température est résolue indépendamment dans le liquide et dans le gaz en utilisant une condition de Dirichlet à l'interface. Cette condition est calculée à l'aide de la relation de Clausius Clapeyron qui lie la température et la fraction massique à l'interface. Finalement, le taux de vaporisation est calculé en évaluant le saut du gradient de température à l'interface. Les étapes de cet algorithme sont à présent décrites :

1. Comme dans le solveur thermique GFTSE pour l'ébullition, la température est résolue dans le gaz avec une condition de Dirichlet à l'interface liquide/gaz. Cette condition est calculée en utilisant les relations (3.26) et (3.27) de sorte que la température à l'interface s'exprime :

$$T^{\Gamma} = \frac{h_{lg}\ m_{vap}\ T^B}{h_{lg}\ m_{vap} - \mathcal{R}\ T^B\ ln(\frac{P_{vap}^{\Gamma}}{P_{atm}})} \tag{3.59}$$

$$P_{vap}^{\Gamma} = \frac{-Y_{vap}^{\Gamma} P_{atm} m_g}{(m_{vap} - m_g) Y_{vap}^{\Gamma} - m_{vap}} \tag{3.60}$$

   La méthode de *Gibou et al.* [30] est utilisée pour calculer ce champ de température (*cf* partie 3.3.1) munie de sa condition à l'interface. Le champ de fraction massique $Y^n$ au temps $t_n$ est utilisé pour évaluer la fraction massique à l'interface $Y_{vap}^{\Gamma}$.
2. La température dans le liquide est ensuite calculée en utilisant la même condition de Dirichlet à l'interface. En effet, comme l'équilibre thermodynamique est supposé, la deuxième loi thermodynamique impose la continuité de la température à l'interface.
3. Les champs de température calculés dans l'étape 1 et 2 sont définis dans les domaines gazeux et liquide respectivement. Pour étendre leurs domaines de définition au système complet, la méthode d'extrapolation développée par *T. Aslam* [2] est utilisée (*cf* partie 3.4.1). De telle sorte que deux champs continus sont calculés : le champ de température dans le gaz (calculé dans l'étape 1) et son extension continue dans le liquide ($T_g^G$) ainsi que le champ de température dans le liquide (calculé dans l'étape 2) et son extension dans le gaz ($T_l^G$).
4. Le taux de vaporisation $\dot{\omega}$ est à présent calculé en utilisant la condition de saut sur le gradient de température (3.49). Le taux de vaporisation n'est calculé qu'au voisinage de l'interface. En effet, les échanges de masse ne se font qu'au niveau de l'interface et par conséquent $\dot{\omega}$ n'a de signification physique quà cet endroit. Cependant, comme le maillage est fixe et ne suit pas les contours de l'interface, la définition de cette valeur se fait sur 5 ou 6 mailles autour de l'interface.
5. Il faut à présent résoudre l'équation de conservation des espèces chimiques dans le gaz avec la condition de Robin (3.56). Pour cela, La méthode développée par *Papac et al.* [77] qui décrit une discrétisation symétrique d'ordre 2 d'une équation de diffusion avec une condition de Robin dans

un domaine irrégulier est utilisée. Cette méthode a été implémentée dans le code $\mathcal{DIVA}$ au cours de cette thèse et est présentée dans la partie 3.3.2.

6. Une fois la fraction massique calculée dans le gaz, la méthode d'extrapolation de *Aslam* [2] (*Cf* partie 3.4.1) est utilisée pour étendre le champ de fraction massique dans le liquide. Ceci dans le but d'évaluer correctement $Y_{vap}^{\Gamma}$.

Les simulations de l'effet Leidenfrost seront réalisées à l'aide de cet algorithme qui permet de simuler la chute d'une goutte en régime d'évaporation sur sa partie supérieure et en régime de transition ébullition/évaporation sur sa partie inférieure lorsqu'elle est proche de la paroi chaude.

Dans la partie suivante, sont détaillées les différentes méthodes de discrétisation spatiale employées pour les algorithmes GFTSB, GFTSE et GFTSEB décrits précédemment.

## 3.3 Résolution spatiale des équations de l'énergie et des espèces chimiques

Dans cette partie seront détaillés les algorithmes de discrétisation spatiale des équations posées dans la partie 3.1. L'algorithme de résolution d'un champ scalaire avec une condition de Dirichlet sur une interface fixe qui n'épouse pas le maillage est présentée. C'est une méthode d'ordre 2 qui s'appuie sur les travaux de *Gibou et al.* [30].

Pour les besoins de l'algorithme hybride, une méthode de discrétisation d'une équation de conservation avec une condition de robin à l'interface a été implémentée dans le cadre de cette thèse. Elle s'appuie sur les travaux de *Papac et al.* [77] et nécessite le calcul de longueurs spécifiques $L_i$ et de la surface d'interface qui traverse la maille. Un algorithme de calcul de volumes et surfaces [66] permettant de calculer ces valeurs est finalement présenté.

### 3.3.1 Discrétisation de l'équation de la température dans un domaine irrégulier avec une condition de Dirichlet à l'interface

*Gibou et al.* [30] proposent une discrétisation spatiale symétrique de l'équation de Poisson dans un domaine irrégulier avec une condition de Dirichlet à l'interface. Cette méthode s'avère être symétrique pour l'ordre 2, elle a donc été implémentée dans le code de calcul $\mathcal{DIVA}$, qui dispose d'un algorithme d'inversion de matrices symétriques de type Gradient Conjugué. Dans la partie 3.2.1, l'équation de la chaleur (3.14) est résolue dans le liquide puis dans le gaz en imposant un condition de Dirichlet $T^{\Gamma} = T^{B}$. On se propose d'écrire la discrétisation 2D de ce type d'équations :

$$(S) \begin{cases} \alpha \dfrac{\partial T}{\partial t} - \nabla.\left(\beta \nabla T\right) = f \\ \\ T^{\Gamma} = g \end{cases} \tag{3.61}$$

La semi discrétisation temporelle de (3.61) est donnée dans (3.62).

$$\alpha T^{n+1} - \Delta t \nabla.\left(\beta \nabla T^{n+1}\right) = \alpha T^{n} + \Delta t \ f^{n} \tag{3.62}$$

La méthode de discrétisation utilisée est de type Volumes Finis, il faut donc intégrer cette équation sur une maille $\Omega_{i,j}$. Ce qui donne la discrétisation (3.63) si la maille est entièrement dans le domaine de calcul.

$$\alpha T_{i,j}^{n+1}\mathcal{V}_{i,j} - \Delta t \left( -\beta_{i,j-\frac{1}{2}} \left.\frac{\partial T^{n+1}}{\partial y}\right|_{i,j-\frac{1}{2}} \Delta x_{i-\frac{1}{2}} + \beta_{i+\frac{1}{2},j} \left.\frac{\partial T^{n+1}}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2},j} \Delta y_{j-\frac{1}{2}} + \right.$$
$$\left. \beta_{i,j+\frac{1}{2}} \left.\frac{\partial T^{n+1}}{\partial y}\right|_{i,j+\frac{1}{2}} \Delta x_{i-\frac{1}{2}} - \beta_{i-\frac{1}{2},j} \left.\frac{\partial T^{n+1}}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2},j} \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \right) = \left(\alpha T_{i,j}^{n} + \Delta t f_{i,j}^{n}\right) \mathcal{V}_{i,j} \tag{3.63}$$

La discrétisation des dérivées partielles sans la présence d'interface pour un maillage non uniforme est donnée dans (3.65) et (3.64).

$$\left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1}} \tag{3.64}$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1}} \tag{3.65}$$

Si l'interface passe entre les points $(x_i, y_j)$ et $(x_{i+1}, y_j)$ (voir Fig 3.1), la variable $T_{i+1,j}$ n'existe pas car le point $(x_{i+1}, y_j)$ n'appartient pas au domaine de calcul.

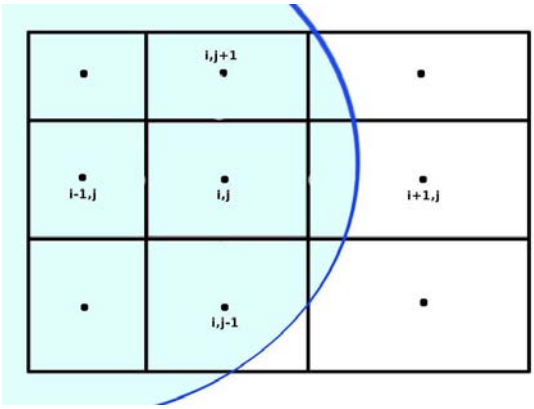



FIGURE 3.1 – Représentation des points du maillage, des mailles considérées et du domaine de calcul (en bleu)

C'est ici que va intervenir la condition de Dirichlet à l'interface. Il est nécessaire de considérer un changement dans la discrétisation (3.66) où $T_{i+1,j}^{G}$ est calculé grâce à la condition limite à l'interface. L'ordre de la discrétisation dépendra de la précision de ce calcul.

$$\frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\Delta x_i} \longrightarrow \frac{T_{i+1,j}^{G} - T_{i,j}}{\Delta x_i} \tag{3.66}$$

Une première solution d'ordre 1 est de prendre la valeur de $T$ au point $I$, le projeté orthogonal de $(x_{i+1}, y_j)$ sur l'interface soit $T_{i+1,j}^{G} = T^{I}$. L'équation (3.67) donne le calcul de $T_{i+1,j}^{G}$ à l'ordre 2.

$$\theta = \frac{|\phi_{i,j}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}|}$$
$$T_{i+1,j}^{G} = \frac{T^{I} + (\theta - 1)T_{i,j}}{\theta} \tag{3.67}$$

La nouvelle dérivée partielle suivant $\vec{e}_x$ est écrite dans (3.68). La valeur de $T^{I}$ est donnée par la

condition à l'interface, elle va donc s'ajouter au deuxième membre du système linéaire.

$$\frac{T^I - T_{i,j}}{\theta\ \Delta x_i} \tag{3.68}$$

La matrice de discrétisation ainsi obtenue est symétrique, ce qui présente un fort intérêt puisque les algorithmes d'inversion de ce type de matrices sont plus rapides.

### 3.3.2 Résolution spatiale sur un domaine 2D de l'équation de conservation des espèces munie d'une condition de Robin à l'interface

**Discrétisation de l'équation**

Le nouvel algorithme hybride nécessite une méthode permettant la résolution numérique de l'équation de conservation des espèces chimiques accompagnée d'une condition de Robin à l'interface. L'enjeu est donc de trouver une méthode adaptée à ce type de problèmes. Dans l'article de *Papac et al.* [77], une méthode numérique très efficace de discrétisation pour les problèmes de Poisson, de Stefan ou de l'équation de la chaleur avec une condition de Robin à l'interface est présentée. Cette méthode, qui est détaillée dans ce paragraphe, nécessite l'implémentation d'un autre algorithme de discrétisation de la fonction de Heaviside et de Dirac (*Min et Gibou* [66]) qui sera exposé dans le prochain paragraphe. Le problème à résoudre est donc le suivant :

$$(S)\begin{cases} \rho\dfrac{\partial Y}{\partial t} - \nabla.\left(\rho D_m \nabla Y\right) = g \\ \\ \dot{\omega} Y^{\Gamma}_{vap} + \rho\ D_m\ \nabla Y\ .\ \vec{n}|_{\Gamma} = f \end{cases} \tag{3.69}$$

Avec $g = -\left(\vec{V}.\nabla\right) Y_m$ et $f = \dot{\omega}$. Il faut commencer par intégrer la première équation sur une maille en 2D $\Omega^-_{i,j} = \Omega_{i,j} \cap \Omega^-$ représentée dans la Fig. 3.2.

$$\int_{\Omega^-_{i,j}} \left(\rho\frac{\partial Y}{\partial t} - \nabla.\left(\rho D_m \nabla Y\right)\right) d\Omega = \int_{\Omega^-_{i,j}} g d\Omega$$

Une discrétisation en temps est ensuite effectuée en faisant une discrétisation de type « Euler » :

$$\underbrace{\int_{\Omega^-_{i,j}} \rho Y^{n+1} d\Omega}_{A} - \Delta t \underbrace{\int_{\Omega^-_{i,j}} \nabla.\left(\rho D_m \nabla Y^{n+1}\right) d\Omega}_{B} = \underbrace{\int_{\Omega^-_{i,j}} \rho Y^{n} d\Omega}_{C} + \Delta t \underbrace{\int_{\Omega^-_{i,j}} g^n d\Omega}_{D}$$

$\mathcal{V}^-_{i,j}$ est la valeur de l'aire de la surface $\Omega^-_{i,j}$, calculée avec l'algorithme expliqué dans le paragraphe suivant. L'approximation numérique des termes du second membre $C$ et $D$ donne :

$$\int_{\Omega^-_{i,j}} \rho Y^n d\Omega + \Delta t \int_{\Omega^-_{i,j}} g^n d\Omega \approx \left(\rho_{i,j} Y^n_{i,j} + \Delta t\ g_{i,j}\right) \mathcal{V}^-_{i,j} \tag{3.70}$$

Le terme $g_{i,j}$ est approximé avec une méthode de WENO5. Prenons à présent le terme de diffusion de l'équation :

$$\int_{\Omega^-_{i,j}} \nabla.\left(\rho D_m \nabla Y^{n+1}\right) d\Omega = \int_{\partial\Omega^-_{i,j}} \rho D_m \nabla Y^{n+1} \,.\, \vec{n}\; dS$$

Dans le cas d'un maillage cartésien comme dans la Fig. 3.2, les frontières de la maille $\Omega^-_{i,j}$ peuvent se décomposer comme suit :

$$\int_{\partial\Omega^-_{i,j}} \rho D_m \nabla Y^{n+1} \,.\, \vec{n}\; dS \;=\; \sum_{i=1}^{5} \int_{L_i} \rho D_m \nabla Y^{n+1} \,.\, \vec{n}\; dS$$

La discrétisation spatiale de cette équation s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{5} \int_{L_i} \rho D_m \nabla Y^{n+1} \,.\, \vec{n}\; dS &= -\int_{L_1} \rho D_m \frac{\partial}{\partial y} Y^{n+1} dS + \int_{L_2} \rho D_m \frac{\partial}{\partial x} Y^{n+1} dS \\ &+ \int_{L_3} \rho D_m \frac{\partial}{\partial y} Y^{n+1} dS - \int_{L_4} \rho D_m \frac{\partial}{\partial x} Y^{n+1} dS + \int_{L_5} \rho D_m \nabla Y^{n+1} \,.\, \vec{n}\; dS \qquad (3.71)\\ &\approx -\frac{Y^{n+1}_{i,j} - Y^{n+1}_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1}} L_1 + \frac{Y^{n+1}_{i+1,j} - Y^{n+1}_{i,j}}{\Delta x_i} L_2 + \frac{Y^{n+1}_{i,j+1} - Y^{n+1}_{i,j}}{\Delta y_j} L_3 \\ &- \frac{Y^{n+1}_{i,j} - Y^{n+1}_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1}} L_4 + \int_{L_5} \rho D_m \nabla Y^{n+1} \,.\, \vec{n} dS \qquad (3.72)\end{aligned}$$

Il reste à calculer l'intégrale sur $L_5 \subset \Gamma$ du gradient de fraction massique. Pour cela, la condition de Robin à l'interface $\Gamma$ est utilisée :

$$\begin{aligned}\int_{L_5} \rho D_m \nabla Y^{n+1} \,.\, \vec{n} dS &= \int_{L_5} f - \dot{\omega} Y^{\Gamma}_{vap} dS \\ &\approx L_5 \left(f_{i,j} - \dot{\omega} Y^{\Gamma}_{i,j}\right)\end{aligned}$$

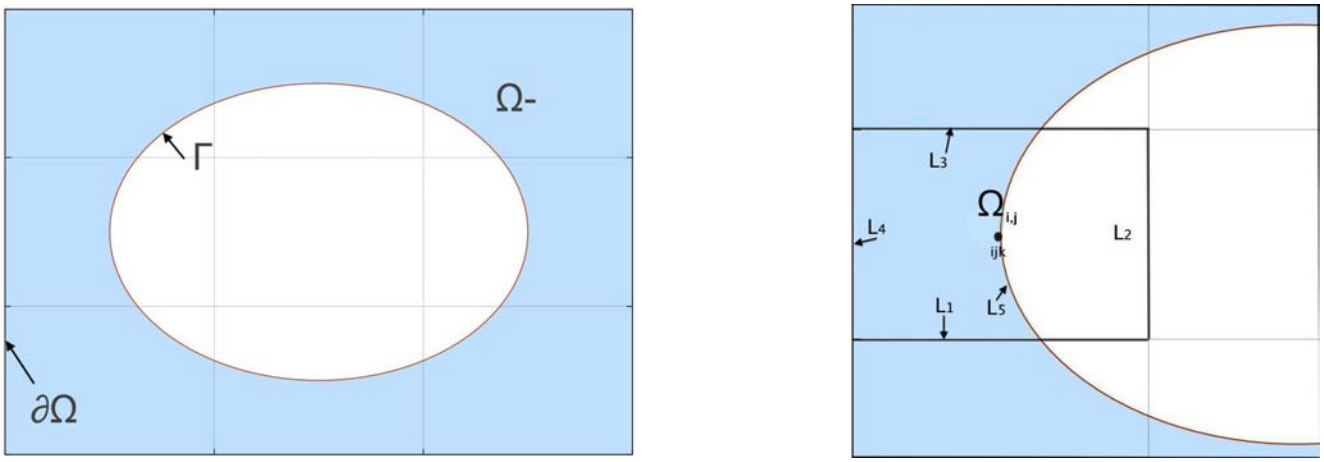



FIGURE 3.2 – Représentation des surfaces $L_1$, $L_2$, $L_3$, $L_4$ et $L_5$ dans une maille traversée par l'interface

Dans cette discrétisation, il faut calculer les valeurs $\mathcal{V}_{i,j}^{-}$, $L_1$, $L_2$, $L_3$, $L_4$ et $L_5$ avec une méthode précise pour ne pas dégrader la précision de la méthode. L'algorithme suivant permet de calculer les surfaces et des volumes à l'ordre 2. Il a été implémenté dans le cadre de cette thèse pour le calcul des valeurs citées ci dessus mais également pour le post-traitement des résultats. Dans [77], les tests numériques réalisés mettent en évidence que cette méthode est d'ordre 2.

### 3.3.3 Calcul géométrique de volumes et surfaces

Afin de connaitre le volume et la surface de la phase dispersée présente dans chacune des cellules du maillage, un programme permettant de faire une integration géométrique des fonctions $\delta$ et de Heaviside dans des domaines irréguliers a été implémenté. La méthode utilisée à été décrite par *C. Min et F. Gibou* dans [67].

Le but est de calculer l'intégrale d'une fonction $f$ sur l'interface $\Gamma$ (3.75) ou sur un sous-domaine $\Omega^-$ (3.76) :

$$\int_{\Gamma} f dS = \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \ . \ \delta(\phi(x)) \ . \ ||\nabla \phi|| dx \tag{3.73}$$

$$\int_{\Omega^-} f d\Omega = \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \ . [1 - H(\phi(x))] \, dx \tag{3.74}$$

Pour $f(x) = 1 \ \forall x \in \mathbb{R}$, l'intégrale 3.75 permet de calculer la surface de la phase dispersée et l'intégrale 3.76 son volume. Les intégrales (3.75) et (3.76) peuvent se décomposer en somme d'intégrales dans les mailles traversées par l'interface d'une part et dans les mailles où la phase dispersée est présente d'autre part.

$$\int_{\Gamma} f dS = \sum_{i,j,k} \int_{\Omega_{i,j,k} \cap \Gamma} f dS \tag{3.75}$$

$$\int_{\Omega^-} f d\Omega = \sum_{i,j,k} \int_{\Omega_{i,j,k} \cap \Omega^-} f d\Omega \tag{3.76}$$

Dans les cellules $\Omega_{i,j}$ qui se trouvent entièrement dans le domaine $\Omega^-$, la formule de quadrature (3.77) est utilisée pour calculer l'intégrale volumique (3.76) :

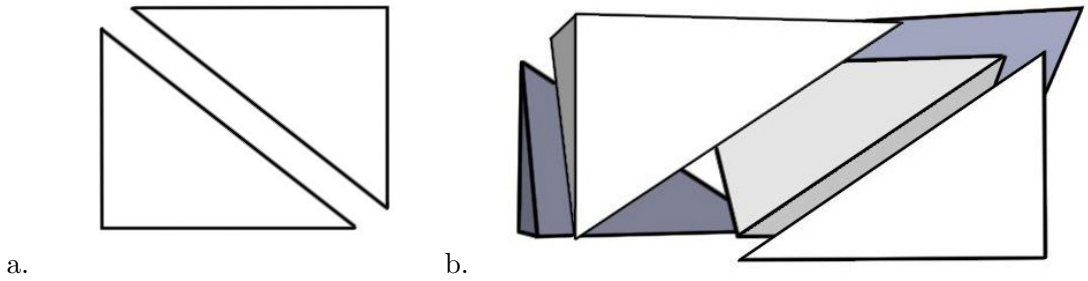
$$\int_{\Omega_{i,j,k}} f(x) d\Omega = \frac{\sum_{k=1}^{N_s} f(x_k)}{N_s} \mathcal{V}_{i,j,k} \tag{3.77}$$

Où $N_s$ est le nombre de sommets $x_k$ de la maille et $\mathcal{V}_{i,j,k}$ son volume.

Ensuite, chaque cellule traversée par l'interface $\Gamma$ est divisée en n-simplexes[6]. La division en n-simplexes peut se faire de différentes façons. En 2D et 2D axisymétrique, les cellules rectangulaires ont

6. triangles à n dimensions

toutes été divisée en deux triangles comme dans la Fig 3.3 a. Ce choix est arbitraire : il est par exemple possible de diviser les rectangles en fonction de l'endroit où passe l'interface. Les calculs d'erreur des tableaux 3.1 et 3.2 montrent que la méthode est précise à l'ordre 2 avec la configuration des triangles choisie, il a donc été jugé inutile de compléxifier l'algorithme de division en simplexes. En 3D, la cellule parallélépipèdique est divisée en 5 tétraèdres comme le montre la Fig 3.3 b.



a. b.

FIGURE 3.3 – Division d'une maille 2D en 2-simplexes (a.) et d'une maille 3D en 3-simplexes (b.)

### Discrétisation des intégrales en deux dimensions

Si l'interface coupe un simplexes 2D, c'est en deux points. Il suffit alors de les localiser pour calculer la longueur du segment qui traverse le simplexe et la surface de la phase dispersée en bleu sur la figure Fig 3.4 a. Si l'interface passe entre les points $A = (x_i, y_j)$ et $B = (x_k, y_l)$, le calcul des coordonnées du point d'intersection $O = (x_m, y_n)$ est donné par les relations suivantes (les notations sont celles de la Fig 3.4 a) :

$$\begin{aligned} x_m &= \frac{x_k\ \phi_{i,j}}{\phi_{i,j} - \phi_{k,l}} - \frac{x_i\ \phi_{k,l}}{\phi_{i,j} - \phi_{k,l}} \\ y_n &= \frac{y_l\ \phi_{i,j}}{\phi_{i,j} - \phi_{k,l}} - \frac{y_j\ \phi_{k,l}}{\phi_{i,j} - \phi_{k,l}} \end{aligned}$$

L'intégrale surfacique sur une maille traversée par l'interface s'écrit comme la somme des intégrales sur les deux simplexes $t_1 = ABC$ et $t_2 = ACD$ qui la composent.

$$\int_{\Omega_{i,j} \cap \Gamma} f dS = \sum_{i=1}^{2} \int_{t_i \cap \Gamma} f dS$$

Si $O = (x_O, y_O)$ et $N = (x_N, y_N)$ sont les points d'intersection entre le simplexe $t_1$ et l'interface $\Gamma$, la discrétisation de l'intégrale sur $t_1$ s'écrit comme suit :

$$\int_{t_1 \cap \Gamma} f dS \approx \frac{f(O) + f(N)}{2}\ ||O - N||$$

Où $||O - N||$ est la longueur du segment $||ON||$. La surface $t_i^- = t_i \cap \Omega^-$ peut être un quadrilatère ou un triangle. Si c'est un triangle (comme $MNC$ dans la Fig. 3.4 a), sa surface est calculée par la formule

suivante :

$$\mathcal{V}_{t_i^-} = \frac{1}{2}\left|(x_N - x_M)(y_C - y_M) - (x_C - x_M)(y_N - y_M)\right| \tag{3.78}$$

Si c'est un quadrilatère (comme $NCBO$ dans la Fig. 3.4 a) sa superficie est en fait la différence entre la superficie du simplexe $t_i$ et celle du triangle $t_i \cap t_i^-$ où $t_i^-$ est le complémentaire de $t_i^-$ dans $t_i$ :

$$\begin{aligned}\mathcal{V}_{t_i^-} &= \mathcal{V}_{ABC} - \mathcal{V}_{AON} \\ &= \frac{1}{2}\left|(x_B - x_A)(y_C - y_A) - (x_C - x_A)(y_B - y_A)\right| - \frac{1}{2}\left|(x_O - x_A)(y_N - y_A) - (x_N - x_A)(y_O - y_A)\right|\end{aligned}$$

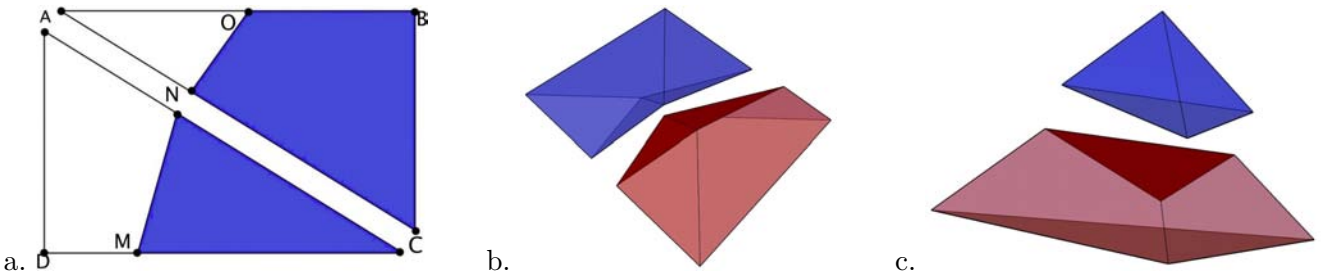
Si $N_t$ est le nombre total de simplexes, $N_s$ le nombre de sommets du polygone $t_i^-$, $x_k$ les sommets et $\mathcal{V}_{t_i^-}$ la superficie de ce polygone alors les intégrales volumiques et surfaciques s'écrivent :

$$\int_{\Omega^-} f(\vec{x})d\Omega = \sum_{i=1}^{N_t}\left[\frac{\sum_{k=1}^{N_s} f(\vec{x}_k)}{N_s}\mathcal{V}_{t_i^-}\right]$$

$$\int_{\Gamma} f(\vec{x})d\Gamma = \sum_{i=1}^{N_t}\left[\frac{f(P_1) + f(P_2)}{2}||P_2 - P_1||\right]$$

**Discrétisation des intégrales en 3 dimensions**

En 3 dimensions le problème est plus complexe. Si l'interface traverse un 3-simplexe, il peut couper le tétraèdre en 3 ou 4 points (*cf* Fig. 3.4 b et c).




a. b. c.

FIGURE 3.4 – n-simplexes en 2D et 3D traversés par l'interface

Si l'interface passe entre deux sommets $A = (x_A, y_A, z_A)$ et $B = (x_B, y_B, z_B)$ du 3-simplexe, les coordonnées du point d'intersection $O = (x_O, y_O, z_O)$ s'écrivent :

$$\begin{aligned}x_O &= \frac{x_B\ \phi_A}{\phi_A - \phi_B} - \frac{x_A\ \phi_B}{\phi_A - \phi_B} \\ y_O &= \frac{y_B\ \phi_A}{\phi_A - \phi_B} - \frac{y_A\ \phi_B}{\phi_A - \phi_B} \\ z_O &= \frac{z_B\ \phi_A}{\phi_A - \phi_B} - \frac{z_A\ \phi_B}{\phi_A - \phi_B}\end{aligned}$$

L'intégrale surfacique sur une maille en 3 dimensions se décompose comme la somme des intégrales sur les 5 simplexes $t_i$.

$$\int_{\Omega_{i,j,k}\cap\Gamma} f(\vec{x})dS \approx \sum_{i=1}^{N_t} \left[ \frac{\sum_{k=1}^{N_s} f(\vec{x}_k)}{N_s} S_{t_i^\Gamma} \right]$$

Dans le cas où le simplexe $t_i$ est coupé par l'interface en 3 points $M\ N\ O$, $S_{t_i^\Gamma} = S_{MNO}$ l'integrale est donnée dans (3.79), dans le cas où elle est traversée par quatre points $M\ N\ O\ P$, $M\ N\ O$, $S_{t_i^\Gamma} = S_{MNOP}$ et la formule est donnée dans (3.80).

$$S_{MNO} = \frac{1}{2}\sqrt{det^2\begin{pmatrix} x_M & x_N & x_O \\ y_M & y_N & y_O \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} + det^2\begin{pmatrix} y_M & y_N & y_O \\ z_M & z_N & z_O \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} + det^2\begin{pmatrix} z_M & z_N & z_O \\ x_M & x_N & x_O \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}} \tag{3.79}$$

$$S_{t_i^\Gamma} = S_{MNOP} = \frac{1}{4}\left(S_{MNO} + S_{NOP} + S_{OPM} + S_{PMN}\right) \tag{3.80}$$

Le calcul du volume $\Omega_{i,j,k} \cap \Omega^-$ lorsque la maille est traversée par l'interface est un problème géométrique basique mais laborieux. Pour parvenir à calculer le volume du polyèdre $\Omega_{i,j,k} \cap \Omega^-$, il a été partitionné en $n$ tétraèdres de sorte que son volume était égal à la somme des volumes des tétraèdres. En connaissant les coordonnées des sommets des tetraètres, leur volume se calcule à l'aide de la formule :

$$\mathcal{V}_{tetra} = \frac{1}{3} S_b\ h \tag{3.81}$$

Où $\mathcal{V}_{tetra}$ est le volume du tetrèdre, $S_b$ la surface de la base et $h$ la hauteur.

### Cas tests et calcul d'ordre

Un avantage de cette méthode d'ordre 2 est que le calcul des intégrales est effectué de manière indépendante pour chaque cellule : il est donc facile de paralléliser le procédé. De plus, ceci permet de recueillir deux informations : la valeur des intégrales (3.75) et (3.76) dans la maille ainsi que la valeur globale du volume et de la surface.

Deux algorithmes de calcul de surfaces et volumes sont comparés : un calcul algébrique développé dans le code $\mathcal{DIVA}$ pour le post-traitement des données (dénommé « Calcul Algébrique ») et la méthode exposée ci-dessus (dénommée « Calcul Géométrique »). Dans le cas des calculs en 2D, les tableaux 3.1 et 3.2 montrent le calcul d'erreur et d'ordre du calcul des périmètre et volumes d'une ellipse et d'un cercle pour les méthodes « Algébriques » et « Géométrique »(Les détails de ce cas test sont présentés dans [66]).

Dans le cas de l'ellipse (Tab. 3.1), le calcul algébrique du périmètre (colonne $\delta$) ne converge pas vers la bonne solution mais la méthode donne de bons résultats pour le calcul du volume (colonne Heaviside) et est d'ordre 2. Le calcul géométrique est d'ordre 2 pour le calcul du périmètre et du volume.

Dans le cas du cercle (Tab. 3.2), la méthode algébrique donne des résultats très précis pour le calcul du périmètre puisque le pourcentage d'erreur pour des maillages grossiers est dérisoire. Pourtant, cette précision est due aux compensations des erreurs de calcul du fait de la symétrie de la figure. En effet, la précision de la méthode pour le calcul du périmètre semble indépendante du maillage. Dans le cas du volume, la méthode algébrique est d'ordre 2. La méthode géomètrique converge vers la valeur théorique du périmètre et du volume du cercle et elle est d'ordre 2.

Les tableaux 3.3 et 3.4 montrent le calcul d'erreur et d'ordre du calcul des surface et volumes d'une ellipsoïde et d'une sphère pour les méthodes « Algébriques » et « Géométrique »(*Cf* [66]). Comme en deux dimensions, l'algorithme algébrique de calcul de surfaces n'est pas en mesure de fournir des résultats satisfaisants dans le cas de l'ellipsoïde même si il donne des valeurs précises dans le cas de la sphère, cette précision est due aux compensations des erreurs numériques. L'algorithme algébrique de calcul des volumes est quant à lui réellement d'ordre 2.

La méthode géomètrique est précise et d'ordre 2 pour le calcul des surfaces et volumes de la sphère et de l'ellipsoïde. De plus, les autres cas tests présentés dans [66] ont également été effectués confirmant l'ordre 2 de cette méthode. Elle sera donc préférée à la première pour réaliser les posts-traitement des données.

| Maillage | Calcul Algébrique | | | | Calcul Géométrique | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| - | $\delta$ | | Heaviside | | $\delta$ | | Heaviside | |
| - | % erreur | ordre | % erreur | ordre | % erreur | ordre | % erreur | ordre |
| $16^2$ | 35,8 | - | 3,47 | - | 1,09 | - | 3,03 | - |
| $32^2$ | 35,6 | - | 0,93 | 1,90 | 0,25 | 2,12 | 0,68 | 2,16 |
| $64^2$ | 35,42 | - | 0,28 | 1,73 | $6,00 \cdot 10^{-2}$ | 2,06 | 0,17 | 2,00 |
| $128^2$ | 35,2 | - | $8,44 \cdot 10^{-2}$ | 1,73 | $1,45 \cdot 10^{-2}$ | 2,04 | $4,1 \cdot 10^{-2}$ | 2,05 |

Table 3.1 – Calcul d'erreur et d'ordre pour le cas d'une ellipse (2D)

| Maillage | Calcul Algébrique | | | | Calcul Géométrique | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | $\delta$ | | Heaviside | | $\delta$ | | Heaviside | |
| - | % erreur | ordre | % erreur | ordre | % erreur | ordre | % erreur | ordre |
| $16^2$ | $6,7 \cdot 10^{-3}$ | - | 2,07 | - | 0,34 | - | 1,22 | - |
| $32^2$ | $2,1 \cdot 10^{-2}$ | - | 0,49 | 2,07 | $7,8 \cdot 10^{-2}$ | 2,12 | 0,28 | 2,12 |
| $64^2$ | $8,00 \cdot 10^{-3}$ | - | 0,12 | 2,03 | $1,89 \cdot 10^{-2}$ | 2,04 | $6,8 \cdot 10^{-2}$ | 2,04 |
| $128^2$ | $1,9 \cdot 10^{-2}$ | - | $2,9 \cdot 10^{-2}$ | 2,04 | $4,65 \cdot 10^{-3}$ | 2,02 | $1,65 \cdot 10^{-2}$ | 2,04 |

Table 3.2 – Calcul d'erreur et d'ordre pour le cas d'un cercle (2D)

| Maillage | Calcul Algébrique | | | | Calcul Géométrique | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | $\delta$ | | Heaviside | | $\delta$ | | Heaviside | |
| - | % erreur | ordre | % erreur | ordre | % erreur | ordre | % erreur | ordre |
| $16^3$ | 56 | - | 5,66 | - | 9,12 | - | 16,24 | - |
| $32^3$ | 25,7 | 1,12 | 1,25 | 2,17 | 1,25 | 2,87 | 2,06 | 2,97 |
| $64^3$ | 53,0 | -1,05 | 0,38 | 1,7 | 0,43 | 1,5 | 0,93 | 1,15 |
| $128^3$ | 51,8 | $3,0 \cdot 10^{-2}$ | $3,6 \cdot 10^{-2}$ | 3,4 | $5,34 \cdot 10^{-2}$ | 3,01 | 0,2 | 2,22 |

TABLE 3.3 – Calcul d'erreur et d'ordre pour le cas d'une ellipsoïde

| Maillage | Calcul Algébrique | | | | Calcul Géométrique | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | $\delta$ | | Heaviside | | $\delta$ | | Heaviside | |
| - | % erreur | ordre | % erreur | ordre | % erreur | ordre | % erreur | ordre |
| $16^3$ | 1,99 | - | 6,25 | - | 1,90 | - | 3,54 | - |
| $32^3$ | 0,51 | 1,96 | 1,56 | 2,0 | 0,43 | 2,14 | 0,83 | 2,09 |
| $64^3$ | $8,7 \cdot 10^{-2}$ | 2,55 | 0,35 | 2,16 | 0,1 | 2,1 | 0,20 | 2,05 |
| $128^3$ | $3,47 \cdot 10^{-2}$ | 1,32 | $8,75 \cdot 10^{-2}$ | 2,0 | $2,62 \cdot 10^{-2}$ | 1,93 | $4,96 \cdot 10^{-2}$ | 2,01 |

TABLE 3.4 – Calcul d'erreur et d'ordre pour le cas d'une sphère

## 3.4 Techniques d'extrapolation et calcul du taux de changement de phase

### 3.4.1 Technique d'extrapolation multidimensionelle

De manière très générale, la méthode « Ghost Fluid »consiste à créer des mailles dites « Fantômes »dans lesquelles sont calculés des données de telle sorte à créer un champ continu au delà du domaine où ces données sont définies. A partir de cette philosophie générale se distinguent l'approche explicite et l'approche implicite.

L'approche implicite a été décrite dans le chapitre 2 partie 2.5 et consiste à calculer un champ $f^{n+1}$ en faisant intervenir des termes sources (conditions de saut) résultant d'interpolations locales. L'approche explicite permet de calculer l'extension du champ $f^n$ en faisant une extrapolation à partir des données de $f^n$ dans son domaine de définition. C'est cette approche qui est exposée dans ce paragraphe.

Pour calculer les données dans les mailles « fantômes », une technique d'extrapolation multidimensionnelle est nécessaire. *T. Aslam* propose dans [2] une méthode d'extrapolation qui nécessite la résolution d'une équation aux dérivées partielles (EDP) inspirée des travaux de *Fedkiw et al.* [25].

Cette méthode permet de faire des extrapolations d'ordre aussi élevé que nécessaire. L'extrapolation constante permet de créer un champ $T$ dans la zone fantôme continu suivant la normale $\vec{n}$ à l'interface. L'extrapolation linéaire assure également la continuité du gradient de $T$ suivant $\vec{n}$ et pour assurer la continuité des dérivées suivantes, il suffit d'utiliser les ordres plus élevés.

Les extrapolations constante, linéaire et quadratique ont été implémentées dans le code $\mathcal{DIVA}$ mais ne seront présentées dans cette partie que les deux premières (pour les autres se rapporter à [2]).

**Extrapolation constante explicite**

La variable $u = T^g$ représente la température dans le gaz définie dans le domaine $\Omega^-$. L'extrapolation constante de cette variable dans le domaine liquide soit $\Omega^+$ est effectuée en résolvant l'EDP suivante :

$$\frac{\partial}{\partial \tau} u + H(\phi)\ \vec{n}.\nabla u = 0 \tag{3.82}$$

C'est une équation de transport avec un temps fictif $\tau$ qui sera résolue à chaque pas de temps $\Delta t$. La fonction $H$ est appelée fonction de Heaviside et est définie comme suit :

$$H(\phi) = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad \phi_{i,j} > 0 \\ \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Le vecteur $\vec{n}$ représente la normale extérieure si le point dans lequel il est évalué se trouve sur l'interface $\Gamma$. De manière plus générale, il est défini de la manière suivante :

$$\vec{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$$

Dans un repère cartésien en deux dimensions, le vecteur $\vec{n}$ s'écrit $(nx, ny)$. La discrétisation « temporelle »explicite de (3.82) s'exprime :

$$u^{m+1} = u^m - \Delta\tau H(\phi) \left( \frac{\partial}{\partial x} u^m\ nx + \frac{\partial}{\partial y} u^m\ ny \right) \tag{3.83}$$

Les valeurs dans le domaine $\Omega^-$ restent inchangées, seules vont évoluer celles du domaine $\Omega^+$. La discrétisation spatiale effectuée avec un schéma « Upwind »s'écrit :

$$\left.\frac{\partial}{\partial x} u^m\right|_{i,j} = \begin{cases} \dfrac{u^m_{i,j} - u^m_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1}} & \text{si} \quad nx_{i,j} > 0 \\ \\ \dfrac{u^m_{i+1,j} - u^m_{i,j}}{\Delta x_i} & \text{sinon} \end{cases} \qquad \left.\frac{\partial}{\partial y} u^m\right|_{i,j} = \begin{cases} \dfrac{u^m_{i,j} - u^m_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1}} & \text{si} \quad ny_{i,j} > 0 \\ \\ \dfrac{u^m_{i,j+1} - u^m_{i,j}}{\Delta y_j} & \text{sinon} \end{cases}$$

La discrétisation spatiale (3.84) n'est stable que si la condition de CFL [7] est respectée. Cette condition donne la limite de stabilité d'un schéma numérique et s'exprime dans ce cas (3.85).

$$u_{i,j}^{m+1} = u_{i,j}^{m} - \Delta\tau H(\phi) \left( \frac{\partial}{\partial x} u^m \Big|_{i,j} \; nx_{i,j} + \frac{\partial}{\partial y} u^m \Big|_{i,j} \; ny_{i,j} \right) \tag{3.84}$$

$$\frac{Max(|nx_{i,j}|, |ny_{i,j}|) \; \Delta\tau}{Min(\Delta x_i, \Delta y_j)} < 1 \tag{3.85}$$

### Extrapolation constante semi-implicite

Les simulations réalisées dans la suite de cette thèse nécessitent d'un maillage très fin dans la zone proche de la paroi. Les valeurs $\Delta x_i$ et $\Delta y_j$ peuvent être très petites, ce qui donne une contrainte très restrictive sur le pas de temps des équations d'interpolation. Dans les simulations effectuées sur le phénomène de Leidenfrost, un maillage très fin au voisinage de la paroi est utilisé de sorte que les plus petites mailles sont une dizaine de fois plus petites que les plus grandes. La qualité de l'extrapolation est donc très inégale suivant taille locale de la maille. Lorsque la goutte est loin de la paroi, une vingtaine d'itérations temporelles fictives (sur $\tau$) sont nécessaires pour obtenir une extension de qualité dans les mailles nécéssaires au calcul. Par contre, lorsque la goutte est proche de la paroi, il était parfois nécessaire de faire plus de 5000 itérations afin d'obtenir un champ étendu assez large pour le calcul. De plus, l'extrapolation des variables est effectuée plusieurs fois par pas de temps, d'où l'importance d'un algorithme rapide.

Avec une discrétisation totalement implicite il est possible de s'affranchir de la condition de CFL sur les extrapolations, mais un tel algorithme peut être couteux en temps de calcul. Une discrétisation semi-implicite suivant la direction vers laquelle les mailles sont les plus fines a été développée. Si $Min(\Delta x_i) < Min(\Delta y_j)$ la discrétisation temporelle s'écrit :

$$u^{m+1} + \Delta\tau H(\phi) \frac{\partial}{\partial x} u^{m+1} \; nx = u^m - \Delta\tau H(\phi) \frac{\partial}{\partial y} u^m \; ny \tag{3.86}$$

De cette manière, la condition de CFL devient bien moins restrictive :

$$\frac{Max \; |ny_{i,j}| \; \Delta\tau}{Min(\Delta y_j)} < 1 \tag{3.87}$$

De même que pour la méthode explicite, un schéma Upwind pour la discrétisation spatiale est utilisé. Le système linéaire est résolu avec une décomposition LU de la matrice tridiagonale et cette méthode est présentée dans l'annexe A.

Dans la partie **Exemples** les algorithmes explicites et semi-implicite sont comparés pour les extrapolations constantes afin de montrer la nécessité d'avoir implémenté cet algorithme. Il est parfois nécessaire de réaliser des extrapolations linéaires des variables afin d'approcher plus exactement les variables et leurs dérivées à l'interface. Dans le paragraphe suivant, la méthode permettant de réaliser des extrapolations

7. Condition de Courant-Friedrichs-Lewy

linéaires est exposée.

### Extrapolation Linéaire

Une extrapolation linéaire conserve la continuité de la variable $u$ et de $\nabla u$ suivant $\vec{n}$. Ce type d'extrapolation est décrit dans [2] et suppose d'abord de calculer $\partial_n u = \vec{n}.\nabla u$ dans la zone où la variable est définie, soit $\Omega^-$. La première étape consiste à résoudre l'EDP suivante :

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\partial_n u\right) + H(\phi)\ \vec{n}.\nabla\left(\partial_n u\right) = 0 \tag{3.88}$$

En fait, c'est une extrapolation constante du gradient de la variable $u$ dans la zone où celle ci n'est pas défini. L'algorithme d'extrapolation constante est donc utilisé pour étendre la variable $\partial_n u$. Une fois $\partial_n u$ calculé, il faut calculer l'extrapolation de $u$ en résolvant une nouvelle EDP :

$$\frac{\partial}{\partial \tau} u + H(\phi)\ \ (\vec{n}.\nabla u - \partial_n u) = 0 \tag{3.89}$$

La discrétisation « temporelle »de cette équation se fait de la même manière que pour l'extrapolation constante. Seulement dans ce cas, il y a un terme source qu'il faut ajouter dans le secomd membre (le vecteur $\mathcal{B}$, voir annexe A).

$$u^{m+1} + \Delta\tau H(\phi)\frac{\partial}{\partial x}u^{m+1}\ nx = u^m - \Delta\tau H(\phi)\left(\frac{\partial}{\partial y}u^m\ ny - \partial_n u^m\right) \tag{3.90}$$

La méthode d'extrapolation constante est à nouveau utilisée pour résoudre cette EDP, en modifiant le vecteur $\mathcal{B}_{i,j}$ (second membre du système linéaire). La variable $\partial_n u^m_{i,j}$ correspond au vecteur obtenu après la résolution de (3.88).

$$\mathcal{B}_l = u^m_{i,j} - \Delta\tau\ H(\phi_{i,j})\ \frac{\partial}{\partial y}u^m\Big|_{i,j}\ ny_{i,j} - \partial_n u^m_{i,j}$$

La partie suivante comporte des exemples d'extrapolation constantes, linéaires et quadratiques permettant de tester l'algorithme implémenté.

### Exemples

L'extrapolation de la fonction $u$ définie dans (3.91) est effectuée. Le domaine de calcul est un carré $[-\pi,\pi]\times[-\pi,\pi]$ et la fonction $\phi(x,y) = \sqrt{x^2+y^2} - 2$, la fonction « Level Set ».

$$u(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{si}\ \ \phi(x,y) > 0 \\ cos(x)\ sin(y) & \text{sinon} \end{cases} \tag{3.91}$$

La Fig. 3.5 montre que la fonction $u$ est continue à travers l'interface dans les trois cas. La continuité du gradient de $u$ est assurée pour les extrapolations linéaires et quadratiques, ce qui n'est pas le cas pour l'extrapolation constante. Les simulations de la Fig. 3.5 ont été réalisées avec un maillage régulier $201 \times 201$ et 300 itérations d'avancement en $\tau$.

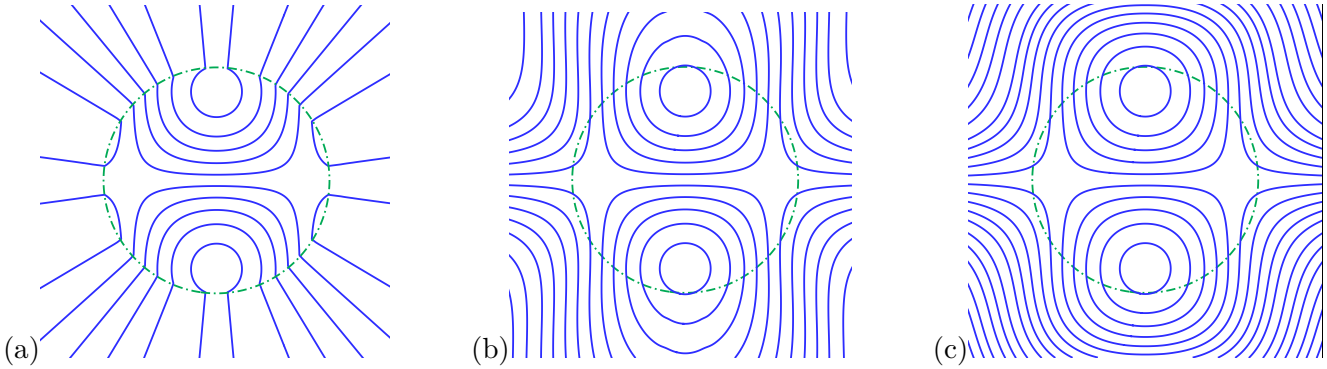



FIGURE 3.5 – Isocontours de la fonction $u$ (lignes bleues) espacés de 0.2 pour des extrapolations constante, linéaire et quadratique. Isocontour $\phi(x,y) = 0$ de la fonction « Level Set »(tirets verts)

Une étude de convergence en maillage a été effectuée pour vérifier l'efficacité de l'algorithme explicite. La solution analytique est facilement calculable. Les résultats pour une extrapolation constante sont présentés dans les colonnes 2 et 3 du tableau Tab. 3.5 et sont equivalents à ceux trouvés dans [2] (colonnes 4 et 5).

| $N_x \times N_y$ | $\|\|.\|\|_2$ | $R_2^{Band}$ | $E_{avg-band}$ [2] | $R_{avg-Band}$ [2] |
|---|---|---|---|---|
| $101 \times 101$ | $3,16\ .\ 10^{-2}$ | - | - | - |
| $201 \times 201$ | $1,59\ .\ 10^{-2}$ | 0,99 | $1,41\ .\ 10^{-2}$ | - |
| $401 \times 401$ | $7,58\ .\ 10^{-3}$ | 1,07 | $6,53\ .\ 10^{-3}$ | 1,11 |
| $801 \times 801$ | $4,25\ .\ 10^{-3}$ | 0,83 | $3,51\ .\ 10^{-3}$ | 0,89 |

TABLE 3.5 – Norme $L^2$ de l'erreur et ordre de convergence pour une extrapolation constante autour de l'interface

La solution analytique $u^A$ utilisée est donnée dans (3.92 ) avec le vecteur normal calculé au point $(x,y)$ donné par $\vec{n}(x,y) = \dfrac{(x,y)}{\sqrt{x^2+y^2}} = (n_x, n_y)$ et la distance à l'interface $\phi(x,y) = \sqrt{x^2+y^2} - 2$..

$$u^A(x,y) = \begin{cases} cos(x - \phi(x,y)\ n_x)\ sin(y - \phi(x,y)\ n_y) & \text{si } \ \phi(x,y) > 0 \\ cos(x)\ sin(y) & \text{sinon} \end{cases} \tag{3.92}$$

Il est parfois nécessaire d'utiliser un algorithme semi-implicite pour calculer l'extension. En effet, si le maillage est non uniforme suivant $\vec{e}_y$ avec $401 \times 401$ points répartis comme suit :

$$\begin{cases} 100 \text{ points} & -0,5\ l_y < y < -0,4\ l_y \\ 301 \text{ points} & -0,4\ l_y < y < 0,5\ l_y \end{cases}$$

Le pas d'espace suivant $\vec{e}_x$ est constant et vaut $\dfrac{\pi}{200} \approx 1,57\ 10^{-2}$. La variation du pas d'espace suivant

$\vec{e}_y$ est considérable : $2,21\ 10^{-3} < \Delta y_j < 1,883\ 10^{-2}$ ; ce qui implique une condition de CFL restrictive pour l'algorithme explicite. L'utilisation d'un algorithme semi-implicite suivant $\vec{e}_y$, permet de s'affranchir de la condition de CFL la plus restrictive, i. e. de celle suivant $\vec{e}_y$. Le tableau Tab. 3.6 montre dans quels cas l'extension calculée est étendue dans l'ensemble du domaine (CV) et les cas où le nombre d'itérations « temporelles »ne sont pas suffisantes pour effectuer une extension sur les plus petites mailles (NCV).

| Nb it. | Implicite | |
|---|---|---|
| —— | Temps de calcul | Convergence |
| 200 | 2,87 | NCV |
| 300 | 4,38 | CV |
| Nb it. | Explicite | |
| —— | Temps de calcul | Convergence |
| 300 | 1,58 | NCV |
| 800 | 3,79 | NCV |
| 2000 | 10,19 | NCV |
| 40000 | 200,4 | NCV |

TABLE 3.6 – Temps de calcul pour une extrapolation implicite et explicite

L'algorithme implicite converge en 4,38 secondes à partir de 300 itérations tandis qu'avec 40000 itérations et un peu plus de 200 secondes de calcul, l'algorithme explicite ne converge toujours pas dans la zone où les $\Delta y_j$ sont les plus petits. La figure 3.6 montre en effet que dans la zone où le maillage est plus grand, les extrapolations des valeurs sont parfaitement calculées tandis que dans la partie inférieure, où le maillage est plus fin, le calcul explicite n'a pas encore convergé alors que le calcul implicite (en bleu) a déjà convergé avec moins d'itérations.

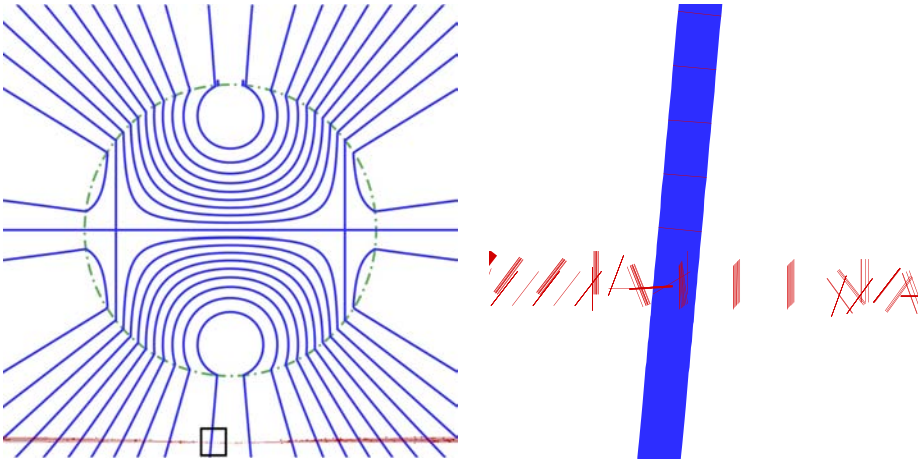


FIGURE 3.6 – Isocontours de la fonction $u$ espacés de 0.2 pour une extrapolations constante implicite (lignes bleues) et explicite (lignes rouges) après 400 itérations temporelles. Isocontour $\phi(x,y) = 0$ de la fonction « Level Set »(tirets verts).

### 3.4.2 Calcul du débit de vaporisation lors d'un changement de phase

Le débit de vaporisation (ou de réaction) $\dot{\omega}$ représente le taux de flux massique de vaporisation par unité de surface et s'exprime en $kg\ .\ s^{-1}\ .\ m^{-2}$. Dans le cas de l'algorithme d'ébullition (partie 3.2.1) et de l'algorithme d'ébullition et évaporation, le débit de réaction est calculé d'abord dans une bande d'environ 8 mailles de chaque côté de l'interface. De cette façon, si $|\phi_{i,j}| \leqslant 8 \times max(\Delta x_i, \Delta y_j)$ :

$$\dot{\omega}_{i,j} = \left[ \lambda_l \left( \frac{T_l^G|_{i+1,j} - T_l^G|_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}\ nx_{i,j} + \frac{T_l^G|_{i,j+1} - T_l^G|_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j}\ ny_{i,j} \right) \right.$$
$$\left. -\lambda_g \left( \frac{T_g^G|_{i+1,j} - T_g^G|_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}\ nx_{i,j} + \frac{T_g^G|_{i,j+1} - T_g^G|_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j}\ ny_{i,j} \right) \right] \frac{1}{h_{lg}} \tag{3.93}$$

En dehors de ce domaine, $\dot{\omega} = 0$. Dans les cas où le calcul du débit de réaction est nécessaire en dehors de ce domaine, une extension de type « Aslam »permet d'étendre le domaine de définition de cette valeur dans tout le domaine :

– réalisation de l'extension d'ordre 2 dans le domaine gazeux en posant comme condition initiale :

$$\begin{cases} \dot{\omega}_{i,j} & \text{si } \ \phi_{i,j} \geqslant 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

– Un nouveau champ continu de valeurs de $\dot{\omega}$ est ainsi obtenu dans le gaz. Il faut poser à présent :

$$\begin{cases} \dot{\omega}_{i,j} & \text{si } \ \phi_{i,j} \leqslant 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

et réaliser une nouvelle extension linéaire dans le domaine liquide. Le résultat est un champ continu dans l'ensemble du domaine.

Dans le cas de l'algorithme d'évaporation, le débit de réaction est calculé à partir du saut du flux de fraction massique 3.55.

$$\dot{\omega}_{i,j} = \left[ \rho_g D_m \left( \frac{Y_g^G\big|_{i+1,j} - Y_g^G\big|_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i} \, nx_{i,j} + \frac{Y_g^G\big|_{i,j+1} - Y_g^G\big|_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j} \, ny_{i,j} \right) \right] \frac{1}{1 - Y_{i,j}} \tag{3.94}$$

Il est également calculé dans une bande de 8 mailles de part et d'autre de l'interface et pour le définir dans tout le domaine, une extension du champ est effectuée de la même façon que pour l'ébullition.

## 3.5 Résolution des équations de Navier-Stokes avec un saut de vitesse

Le maillage utilisé pour faire les simulations de l'effet Leidenfrost est très resserré à l'approche de la paroi. En effet, la couche de vapeur qui se forme sous la goutte est très fine par rapport à sa taille ce qui fait que les petites mailles peuvent être plus de dix fois plus petites que les grandes. La condition de CFL dûe à la viscosité (*Cf* partie 2.2.3) devient donc trop restrictive pour effectuer des simulations exploitables dans un délai raisonnable. Il est donc indispensable de traiter le terme visqueux de manière implicite afin de s'affranchir de cette condition de CFL. La méthode « Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous Method » (GFSCVM) présentée dans la partie 2.3.5 est utilisée avec les modifications nécessaires au traitement implicite du terme visqueux en présence de changement de phase.

Cette partie est consacrée à l'exposition de la méthode implicite de discrétisation du terme visqueux et aux différents types d'extrapolation de la vitesse en présence de changement de phase.

### 3.5.1 Traitement implicite des termes visqueux en présence de changement de phase

En raison du changement de phase liquide-vapeur, les vitesses ne sont plus continues à l'interface entre le liquide et le gaz. Cette discontinuité doit être prise en compte lors de la résolution des équations de Navier-Stokes. Dans le chapitre 2 ont été exposées trois méthodes de projection qui traitent le terme lié à la viscosité de façon explicite mais de manière différente : « Ghost Fluid Primitive Viscous Method »« Ghost Fluid Conservative Viscous Method » et « Ghost Fluid semi-conservative Viscous Method ».

La méthode de projection GFPVM permet de traiter le terme visqueux de manière implicite, mais les sauts des contraintes visqueuses ne sont plus valides lorsque les vitesses sont discontinues à l'interface. Cette méthode ne peut donc être utilisée dans le cas des changements de phase.

Même si la méthode GFCVM est adaptée au changement de phase, l'implicitation complète du terme visqueux conduit à un système couplé car les composantes $v$ et $w$ de la vitesse au temps $t^{n+1}$ interviennent dans le calcul de la composante $u$ (de même pour le calcul de $v$ et $w$). Il est cependant possible de réaliser une « semi-implicitation »de ce terme écrite ici en 2D :

$$\rho^{n+1}u_1^* - \Delta t\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(2\mu\frac{\partial u_1^*}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial u_1^*}{\partial y}\right)\right) = \rho^{n+1}\left(u^n - \Delta t\left(\vec{V}^n\ .\ \nabla\right)u^n\right) + \Delta t\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial v^n}{\partial x}\right)$$

$$\rho^{n+1}v_1^* - \Delta t\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial v_1^*}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(2\mu\frac{\partial v_1^*}{\partial y}\right)\right) = \rho^{n+1}\left(v^n - \Delta t\left(\vec{V}^n\ .\ \nabla\right)v^n\right) + \Delta t\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial u^n}{\partial x}\right)$$

Malheureusement, une telle discrétisation ne permet vraisemblablement pas de s'affranchir totalement de la condition de CFL liée au terme de viscosité en raison du traitement explicite d'une partie de ce terme. C'est pourquoi c'est la méthode « Ghost Fluid Semi-Conservative Viscous Method » qui a été utilisée pour impliciter le terme visqueux dans les simulations effectuées dans le chapitre 4.

**Méthode de projection GFSCVM avec un traitement implicite du terme visqueux :**

En présence de changement de phase, la vitesse n'est pas continue à l'interface et cette discontinuité doit être prise en compte dans le calcul des equations de Navier Stokes :

$$[\ \vec{V}\ ]_\Gamma = -\left[\frac{1}{\rho}\right]_\Gamma \dot{\omega}\vec{n} \tag{3.95}$$

Dans [71], *Nguyen et al.* proposent une méthode de type Ghost Fluid pour imposer une condition de saut à l'interface en définissant des cellules « fantomes » pour le champ de vitesse afin de préserver la singularité de l'interface où s'applique cette condition. Cette méthode a été initialement implémentée pour la simulation de fronts de flamme. Elle a ensuite été appliquée avec succès dans [29] et [97] à la simulation de l'ébullition.

Nous proposons ici une adaptation de la méthode originelle [71] à des situations pour lesquelles la discrétisation temporelle du terme visqueux est implicite. En effet, dans [71] les auteurs traitent un cas non-visqueux alors que dans [29] et [97] les auteurs utilisent une discrétisation temporelle explicite des termes visqueux.

Dans un premier temps, l'équation de prédiction suivante doit être résolue simultanément pour les deux champs :

$$\rho^{n+1}\vec{V}^* - \Delta t\ \nabla.\left(\mu\nabla\vec{V}^*\right) = \rho^{n+1}\left(\vec{V}^n - \Delta t\left(\vec{V}_l^n\ .\ \nabla\right)\vec{V}_l^n - \vec{g}\right) \quad \text{si} \quad \phi < 0 \tag{3.96}$$

$$\rho^{n+1}\vec{V}^* - \Delta t\ \nabla.\left(\mu\nabla\vec{V}^*\right) = \rho^{n+1}\left(\vec{V}^n - \Delta t\left(\vec{V}_g^n\ .\ \nabla\right)\vec{V}_g^n - \vec{g}\right) \quad \text{si} \quad \phi > 0 \tag{3.97}$$

La résolution du système linéaire résultant de la discrétisation de cette équation de Helmoltz pour chaque composante de vitesse est réalisée grâce à un algorithme ICCG. Notons que la condition de saut vectorielle (3.95) doit être projeté suivant chacune des directions afin d'imposer le saut de vitesse correct sur chaque composante.

$$\begin{cases} [u]_\Gamma &= -\left[\frac{1}{\rho}\right]_\Gamma \dot{\omega}\ n_x \\ \\ [v]_\Gamma &= -\left[\frac{1}{\rho}\right]_\Gamma \dot{\omega}\ n_y \end{cases} \tag{3.98}$$

Ces conditions de saut sont imposées en utilisant les méthodes adéquates proposées dans [55] et décrites dans la partie 2.5 de ce manuscrit. Une fois la prédiction de la vitesse intermédiaire $\vec{V}^*$ effectuée, l'extension suivante est réalisée pour $\vec{V}^*$ :

$$\begin{cases} \vec{V}_l^* &= \vec{V}^* & \text{si} \quad \phi > 0 \\ \\ \vec{V}_l^{*ghost} &= \vec{V}^* - \dot{\omega}^n \left[\frac{1}{\rho}\right]_\Gamma \vec{n} & \text{si} \quad \phi \leqslant 0 \end{cases} \tag{3.99}$$

$$\begin{cases} \vec{V}_g^{*ghost} &= \vec{V}^* + \dot{\omega}^n \left[\frac{1}{\rho}\right]_\Gamma \vec{n} & \text{si} \quad \phi > 0 \\ \\ \vec{V}_g^* &= \vec{V}^* & \text{si} \quad \phi \leqslant 0 \end{cases} \tag{3.100}$$

L'équation de poisson suivante peut ensuite être résolue :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right) = \frac{\nabla . \vec{V}_l^*}{\Delta t} \quad \text{si} \quad \phi > 0 \tag{3.101}$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho^{n+1}}\right) = \frac{\nabla . \vec{V}_g^*}{\Delta t} \quad \text{si} \quad \phi < 0 \tag{3.102}$$

Avec la condition de saut adéquate pour tenir compte des effets capillaires et des effets visqueux à l'interface :

$$[P]_\Gamma = \sigma\kappa + \left[\mu \frac{\partial V_n}{\partial n}\right]_\Gamma - \dot{\omega}^2 \left[\frac{1}{\rho}\right]_\Gamma \tag{3.103}$$

Finalement, le champ de vitesse au temps $t^{n+1}$ s'écrit :

$$\vec{V}^{n+1} = \vec{V}^* - \frac{\Delta t}{\rho^{n+1}} \left(\nabla P^{n+1} - \left(\sigma\kappa + \left[\mu \frac{\partial V_n}{\partial n}\right]_\Gamma - \dot{\omega}^2 \left[\frac{1}{\rho}\right]_\Gamma\right) \vec{n}\delta_\Gamma\right) \tag{3.104}$$

Le terme $-\dot{\omega}^2 \left[\frac{1}{\rho}\right]_\Gamma$ de l'équation (3.103) n'est pas significatif dans les cas considérés dans cette thèse car $\dot{\omega} < 1$ et $\left[\frac{1}{\rho}\right]_\Gamma \sim 1$.

### 3.5.2 Extrapolation constante du champ de vitesses et extrapolation respectant la condition d'incompressibilité

Après avoir constaté dans [96] que la méthode proposée dans [71] n'était pas adaptée à la simulation d'évaporation de gouttes ( contrairement à l'ébullition comme il a été montré dans [29] et [97]), les auteurs proposent d'améliorer cette méthode afin que l'extrapolation du champ de vitesse liquide respecte la condition de divergence nulle.

Cela est fait en résolvant une équation de Poisson supplémentaire pour une pression $P^{ghost}$ qui permet de déterminer un champ de pression « ghost » dans le domaine gazeux :

$$\Delta t \ \nabla \ . \ \left( \frac{\nabla P^{ghost}}{\rho^{n+1}} \right) \quad = \quad \nabla \ . \ \vec{V}_l^* \tag{3.105}$$

Il en résulte finalement l'extrapolation suivante pour le champ de vitesse liquide :

$$\begin{cases} \vec{V}_l^{n+1} \quad = \quad \vec{V}^{n+1} \qquad \text{si} \quad \phi > 0 \\ \\ \vec{V}_l^{n+1} \quad = \quad \vec{V}_l^* - \Delta t \ \dfrac{\nabla P^{ghost}}{\rho^{n+1}} \quad \text{si} \quad \phi \leqslant 0 \end{cases} \tag{3.106}$$

L'extrapolation dans le domaine gazeux peut être effectuée de la même manière que pour la vitesse $\vec{V}^*$. Grâce à cette extension à divergence nulle les auteurs montrent que les problèmes de conservation de la masse rencontrés avec les techniques précédentes pour les simulations d'évaporation de gouttes sont résolus. Nous utiliserons donc systématiquement dans la suite de ce travail cette extrapolation (malgré son coût élevé), car toutes nos simulations traiteront de l'évaporation de gouttes.

### 3.5.3 Transport de l'interface en présence de changement de phase

Le mouvement de l'interface en présence de changement de phase est capturé à l'aide de la méthode Level Set et l'équation d'évolution de la fonction $\phi$ s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \left( \vec{V}_{int} . \nabla \right) \phi = 0 \tag{3.107}$$

Où $\vec{V}_{int}$ est la vitesse de l'interface. Même si cette vitesse n'a de signification physique qu'à l'interface, elle doit être continuement étendue dans tout le domaine afin de résoudre l'équation (3.107) avec un champ de vitesse uniforme. Si il n'y a pas de changement de phase, la vitesse de l'interface est égale à la vitesse du fluide à l'interface qui est continue. Par contre, dans le cas des changements de phase (où il y a discontinuité des vitesses à l'interface), la vitesse doit être calculée à partir de l'une des relations suivantes [29] :

$$\vec{V}_{int} = \vec{V}_g + \frac{\dot{\omega}}{\rho_g} \vec{n} = \vec{V}_l + \frac{\dot{\omega}}{\rho_l} \vec{n} \tag{3.108}$$

Une des propriétés importantes de cette méthode numérique réside dans sa capacité à extraire le champ de vitesse dans le domaine gazeux à partir du champ de vitesse dans le liquide et d'éviter de transporter l'interface avec un champ de vitesse non conforme.

Dans le cas des changements de phase, la méthode Delta Function est inéficace car le saut des vitesses à l'interface est lissé et donc son transport est effectué avec une vitesse erronée. En effet, il a été montré dans [97] que cela conduit à une mauvaise prédiction du rayon d'une bulle en ébullition avec un débit de vaporisation constant.

## 3.6 Validation des modèles

Les développements numériques présentés dans les sections précédentes ont été réalisés dans des configurations 2D. Toutes ces méthodes sont généralisables à des configurations axisymétrique et 3D aussi dans le code de calcul $\mathcal{DIVA}$ elles ont été implémentés dans ces 3 configurations possible.

### 3.6.1 Commentaires sur le modèle thermodynamique utilisé

Pour réaliser ce travail nous avons effectué une hypothèse restrictive en supposant que le mélange gazeux était incompressible et que toutes les propriétés physiques étaient constantes et donc indépendantes de la température locale et de la fraction de mélange locale. Il est pourtant bien établi que la thermo-dépendance des propriétés des fluides peut avoir une influence significative sur le débit d'évaporation d'une goutte et sur sa dynamique d'échauffement, c'est d'autant plus vrai que les écarts de température considérés sont importants. Dans l'étude proposée, l'effort a essentiellement porté sur le développement d'un modèle de vaporisation adapté à l'effet Leidenfrost et à l'adaptation des solveurs traditionnels à des maillages localement très raffinés. Aussi, cette thermo-dépendance a été occultée, car nous ne disposions pas du temps nécessaire pour développer un modèle abouti permettant de tenir compte de toutes les subtilités inhérentes à une prise en compte judicieuse de la thermo-dépendance des variables physiques. Notons que ces variations en fonction de la température (et du mélange) peuvent impliquer des couplages thermodynamiques non triviaux, notamment pour la masse volumique (convection naturelle, expansion ou rétractation thermique) et la tension de surface (effet Marangoni). Nous verrons d'ailleurs dans la conclusion que le développement et la résolution d'un modèle thermodynamique plus complet constitue l'une des principales perspectives de cette étude.

### 3.6.2 Évaporation d'une goutte quasi-statique : loi de décroissance du diamètre

L'objectif de cette section est de valider l'algorithme GFTSEB à l'aide de la simulation numérique d'une goutte statique qui s'évapore. Le cas théorique, traditionnellement appelé « Loi du $d^2$ » est exposé dans un premier temps.

#### Cas théorique

La loi de récession en $d^2$ est utilisée pour valider le modèle d'ébullition et évaporation développé pendant cette thèse et décrit dans ce chapitre. Soit une goutte sphérique de liquide pur en évaporation dans l'air. Il est possible de montrer que le diamètre de la goutte au carré $d^2$ décroit de manière linéaire [8, 9]. Pour cela, il faut d'abord considérer le cas où la goutte est alimentée en liquide de façon continue.

Les équations de bilan pour le cas de cette goutte sphérique s'écrivent exclusivement en fonction de la variable $r$, qui représente la distance au centre de la goutte, du fait de la symétrie sphérique du phénomène. L'hypothèse est faite que les coefficients de diffusion du liquide et du gaz sont égaux à

la diffusivité thermique D. Les équations de bilan de la masse (3.109), de conservation de la fraction massique de l'espèce initialement liquide (3.110) et du bilan de l'énergie (3.111) s'écrivent :

$$\frac{d\left(4\pi r^2 \rho u_r\right)}{dr} = 0 \tag{3.109}$$

$$\frac{d\left(4\pi r^2 \rho u_r Y\right)}{dr} = \frac{d\left(4\pi r^2 \rho D \frac{dY}{dr}\right)}{dr} \tag{3.110}$$

$$\frac{d\left(4\pi r^2 \rho u_r T\right)}{dr} = \frac{d\left(4\pi r^2 \rho D \frac{dT}{dr}\right)}{dr} \tag{3.111}$$

L'intégration de l'équation (3.109), permet d'écrire que $4\pi r^2 \rho u_r = m$ où $m$ est une constante. L'intégration de (3.110) et (3.111) donne :

$$mY - 4\pi r^2 \rho D \frac{dY}{dr} = K_1 \tag{3.112}$$

$$mT - 4\pi r^2 \rho D \frac{dT}{dr} = K_2 \tag{3.113}$$

Les variables $K_1$ et $K_2$ sont des constantes à déterminer avec les conditions aux limites. Le flux de fraction massique de liquide qui s'échappe de la goutte est égal à celui qui est rajouté pour maintenir la goutte de la même taille : $K_1 = m$. Le flux de chaleur à l'interface sert à la fois à vaporiser le liquide et à le chauffer. L'équation (3.113) à la surface de la goutte s'écrit :

$$4\pi \rho D r_g^2 \left.\frac{dT}{dr}\right|_g = \frac{m\ L_v}{C_p} + \frac{\Phi_i}{C_p} = \frac{m\ L_{ve}}{C_p} \tag{3.114}$$

Où $r_g$ est le rayon de la goutte, $L_v$ la chaleur latente de vaporisation, $\Phi_i$ le flux de chaleur servant à chauffer la goutte et $L_{ve} = L_v + \Phi_i$. Les solutions des équations différentielles du premier ordre (3.112) et (3.113) sont :

$$Y(r) = K_3 e^{-\frac{m}{4\ \pi\ \rho\ D\ r}} + 1 \tag{3.115}$$

$$T(r) = K_4 e^{-\frac{m}{4\ \pi\ \rho\ D\ r}} + \left(T_g - \frac{L_{ve}}{C_p}\right) \tag{3.116}$$

Les coefficients $K_3$ et $K_4$ se calculent en utilisant les conditions à l'infini. Ainsi, $k_3 = Y_\infty - 1$ et $K_4 = T_\infty - T_g + \dfrac{L_{ve}}{C_p}$ de telle sorte que :

$$Ln\left(\frac{1-Y}{1-Y_\infty}\right) = -\frac{m}{4\ \pi\ \rho\ D\ r} \tag{3.117}$$

$$Ln\left(\frac{T - T_g + \frac{L_{ve}}{C_p}}{T_\infty - T_g + \frac{L_{ve}}{C_p}}\right) = -\frac{m}{4\ \pi\ \rho\ D\ r} \tag{3.118}$$

En se plaçant sur l'interface entre le liquide et le gaz, les relations précédentes permettent d'écrire :

$$Ln\left(\frac{L_{ve}}{C_p\left(T_\infty - T_g\right) + L_{ve}} \times \frac{1 - Y_\infty}{1 - Y_g}\right) = 0$$
$$\Rightarrow \frac{L_{ve}}{C_p\left(T_\infty - T_g\right) + L_{ve}} \times \frac{1 - Y_\infty}{1 - Y_g} = 1$$

Il est maintenant possible d'écrire la relation (3.119) qui définit le rapport $B_{vap}$. En utilisant la relation (3.117), la valeur de $m$ s'exprime en fonction de $B_{vap}$ (3.120).

$$B_{vap} = \frac{Y_g - Y_\infty}{1 - Y_g} = \frac{C_p\left(T_\infty - T_g\right)}{L_{ve}} \tag{3.119}$$
$$m = 4\pi r_g \rho D ln\left(1 + B_{vap}\right) \tag{3.120}$$

Pour connaitre la valeur de $m$, il suffit donc de calculer $B_{vap}$, ce qui implique de connaitre soit la fraction massique à l'interface $Y_g$, soit la température $T_g$ à l'interface.

Dans un cas plus réaliste dans lequel la goutte se vaporise sans être alimentée en liquide, le rayon de la goutte diminue au cours du temps. Dans ce cas quasi stationnaire, il est possible de considérer que cette diminution de rayon correspond au débit de liquide à ajouter pour garder la goutte stationnaire (3.121).

$$m = -\frac{d}{dt}\left(\frac{4\pi r^3 \rho_l}{3}\right) \tag{3.121}$$
$$\Rightarrow \frac{d\ r}{dt} = -\frac{m}{4\pi r^2 \rho_l} \tag{3.122}$$

Après avoir remplacé $m$ par la relation (3.120), il faut résoudre une équation différentielle (3.123).

$$\frac{d\ r^2}{dt} = -2\ \frac{\rho_g\ D}{\rho_l} Ln\left(1 + B_{vap}\right) \tag{3.123}$$
$$r^2 = r_0^2 - 2\ \frac{\rho_g\ D}{\rho_l} Ln\left(1 + B_{vap}\right) t \tag{3.124}$$

Cette loi est traditionnellement exprimée en fonction du diamètre de la goutte $d$, du diamètre initial $d_0$ et de la constante $K = 8\ \frac{\rho_g\ D}{\rho_l} Ln\left(1 + B_{vap}\right)$ :

$$d^2 = d_0^2 - Kt \tag{3.125}$$

### 3.6.3 Évaporation d'une goutte sphérique en mouvement

Dans cette section, une étude numérique comparative entre l'algorithme GFTSE et l'algorithme GFTSEB a été menée afin de s'assurer de l'équivalence des deux méthodes dans une situation pour laquelle la méthode GFTSE est adaptée. Rappelons que dans *Tanguy et al.* [96], une étude de convergence a été réalisée dans le cas de l'évaporation d'une goutte statique en utilisant la méthode GFTSE.

Grâce à cette étude de convergence il a été montré que la méthode utilisée permettait de retrouver la

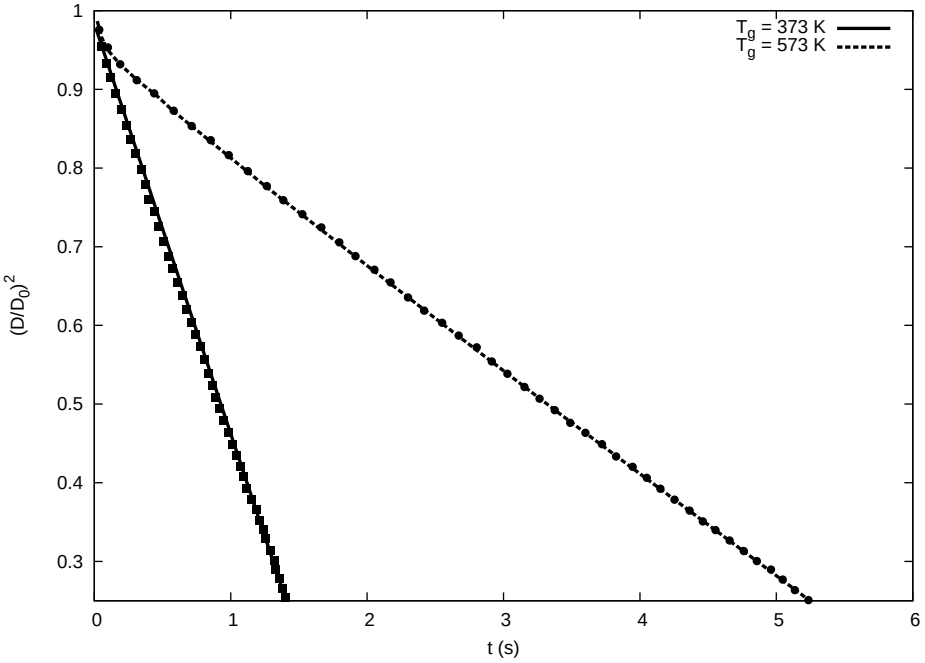



FIGURE 3.7 – Evolution du diamètre adimensionné au carré en fonction du temps pour deux températures initiales de gaz $T_g$. Résultats de *Tanguy et al.* [96].

loi théorique dite du $D^2$ (3.125) pour une goutte d'eau de diamètre $D_0 = 300\mu m$ et que les simulations présentées étaient parfaitement convergées avec 16 et 32 mailles dans un rayon de gouttes (Fig. 3.7) . Pour faciliter la réalisation de cette étude, les auteurs ont utilisé un solveur simplifié pour calculer l'écoulement de Stefan généré par l'évaporation de la goutte.

En effet, l'écoulement de Stefan étant radial dans le cas d'une goutte statique isolée, on peut aisément en déduire que c'est un écoulement irrotationnel que l'on peut calculer en résolvant simplement une équation de Laplace, à la place des équations de Navier-Stokes. Cette approche simplifiée a pour principaux intérêts de s'affranchir des contraintes liées à la viscosité et à la tension de surface sur le pas de temps, et d'éviter de perturber la solution à cause du développement de courants parasites aux temps longs.

A partir de là, la convergence spatiale des méthodes implémentées pour la résolution du champ de température, du champ de fraction massique et des changements de phase peut être étudiée beaucoup plus simplement que lorsque l'on utilise une résolution complète des équations de Navier-Stokes diphasique.

Dans cette section, les simulations sont réalisées dans une configuration plus complexe puisque l'on s'intéresse à l'évaporation d'une goutte en mouvement dans un gaz chaud (ce qui implique donc une résolution complète des équations de Navier-Stokes diphasique). Afin d'accélérer l'évaporation de la goutte, nous avons choisi de travailler avec un liquide très volatile (l'acétone, voir les propriétés physiques utilisés dans la table 3.7) et dans un environnement gazeux très chaud ($T_\infty = 1073K$).

Cependant, la forte disparité entre le temps caractéristique nécessaire à la résolution des ondes capillaires à l'interface et le temps caractéristique de l'évaporation constitue un véritable problème pour effectuer ce type de simulations, puisque même pour un maillage relativement modeste (64 x 128) un

| Fluide | $\rho$ | $\mu$ | $C_p$ | $\kappa$ | $\sigma$ | $T^B$ | $h_{lg}$ | $D_m$ | $M$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Acetone (liquide) | 786 | $0,000326$ | 2155 | 0.161 | 0.0237 | 329 | 518000 | $1.2410^{-5}$ | $58.10^{-3}$ |
| Air (gaz) | $0,7$ | $0,00002$ | 1000 | $0,046$ | - | - | - | - | $28,97.10^{-3}$ |

TABLE 3.7 – Propriété des fluides en unités SI

million d'itérations temporelles ont été nécessaires pour pouvoir simuler une phase d'évaporation suffisamment longue.

Les simulations sont effectuées dans une configuration axisymétrique. Le diamètre initial de la goutte vaut $D_0 = 250\mu m$, les dimensions du domaine valent $l_r = 4D_0$ et $l_z = 8D_0$, afin d'éviter les effets de confinement. Le maillage est uniforme à l'intérieur la goutte et dans le gaz à une distance $D_0/2$ de l'interface. Au-delà de cette distance on utilise un maillage non-uniforme continûment déraffiné afin de diminuer le nombre total de points de discrétisation. La goutte a une vitesse initiale $V_z = -1m.s^{-1}$

Ce maillage nous a permis d'effectuer des simulations avec 16 points de discrétisation dans un rayon de goutte à l'instant initial (critère suffisant pour la résolution de l'évaporation d'une goutte dans [96], ainsi que pour calculer la traînée d'une bulle dans le chapitre 2). Enfin, la distance parcourue par la goutte étant importante avant que l'on puisse mesurer une évaporation significative, la simulation a été effectuée en utilisant un repère mobile (qui bouge à la vitesse de la goutte) de telle sorte que la goutte reste figée au centre du domaine de calcul. A l'instant initial, la température moyenne de la goutte d'acétone est égale à 303 K.

Comme indiqué précédemment, une simulation a été effectuée avec la méthode GFTSE, puis la méthode GFTSEB a été testée dans la même configuration. Les résultats des simulations sont présentés sur les figures 3.8, 3.9 et 3.10.

L'évolution temporelle du diamètre adimensionné au carré est tracée sur la figure 3.8 pour les 2 algorithmes de résolution utilisés. Cette comparaison met en évidence la concordance des deux méthodes sur l'évolution du diamètre. On notera en particulier qu'à l'instant final $t_f = 0.06s$, le diamètre au carré a diminué d'environ 50% ce qui correspond à une diminution du diamètre de l'ordre de 30% et une masse évaporée de l'ordre de 65%.

Sur la figure 3.9, l'évolution temporelle de la température moyenne de la goutte a été tracée. Comme attendu, dans les deux cas la température moyenne de la goutte tend vers une valeur stationnaire. Là encore, la concordance entre les deux méthodes est bonne. La méthode GFTSEB conduisant à une température moyenne légèrement plus élevée ($0.5K$) que la méthode GFTSE.

Enfin sur la figure 3.10, l'évolution temporelle du nombre de Reynolds est tracée. On constate que le nombre de Reynolds de la goutte est environ divisé par 3 entre l'instant initial et l'instant final de la simulation (la gravité est prise égale à zéro, donc la goutte doit logiquement freiner jusqu'à l'arrêt total). Dans ce cas les deux courbes sont parfaitement confondues. L'examen des résultats extraits de ces deux simulations permettent de vérifier sans ambiguïté la bonne concordance des deux méthodes utilisées, cela constitue donc une validation probante de la méthode GFTSEB développée dans le cadre de cette étude.

Pour mieux illustrer ce cas-test nous avons également tracé sur plusieurs figures des instantanés des champs calculés. Sur les figures 3.11.a et 3.11.b, on peut comparer le champ de température et les lignes de courant à l'intérieur et à l'extérieur de la goutte pour les deux méthodes à un instant donné.

Sur la figure 3.12.a le champ de fraction massique et les lignes de courant sont tracés à un instant donné

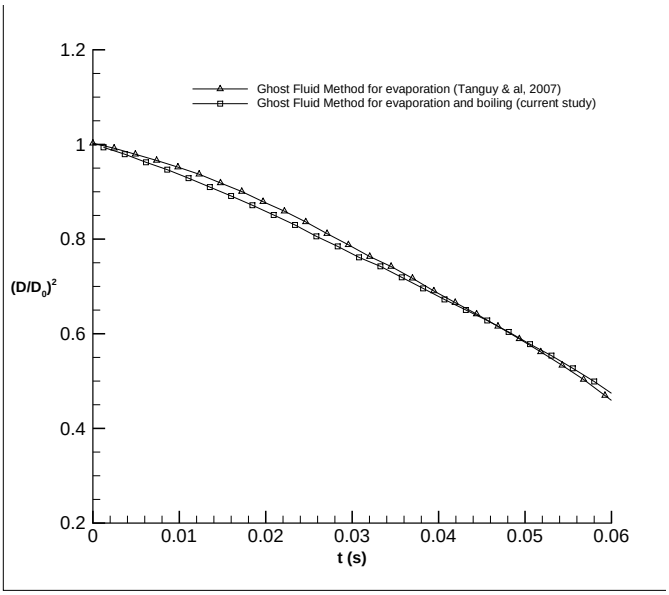



FIGURE 3.8 – Evolution du carré du diamètre adimensionné en fonction du temps pour les méthodes GFTSE (▲) et GFTSEB (■)

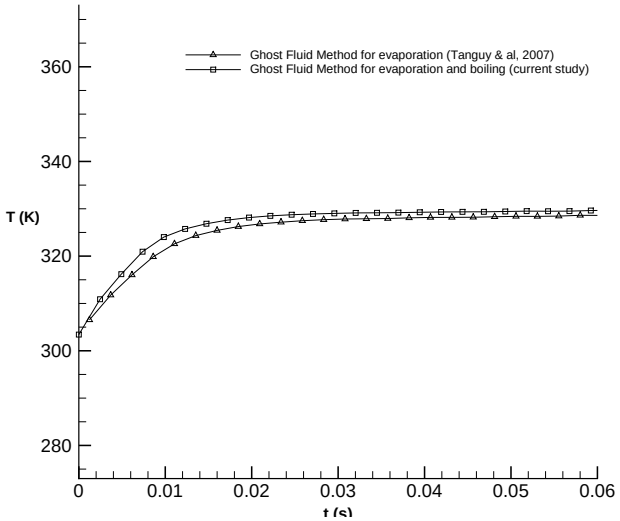



FIGURE 3.9 – Evolution de la température moyenne de la goutte en fonction du temps pour les méthodes GFTSE (▲) et GFTSEB (■)

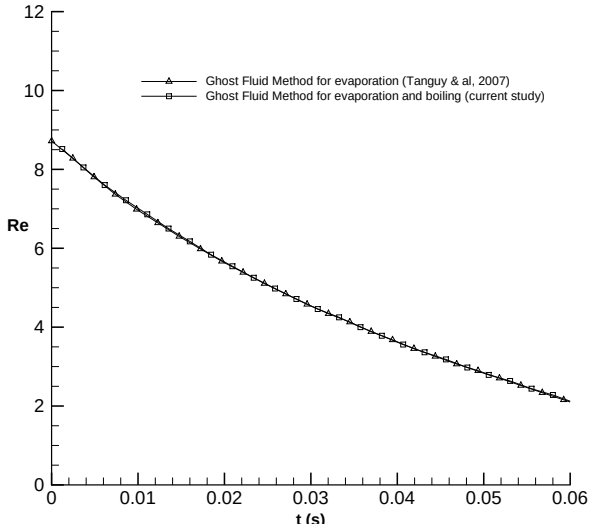



FIGURE 3.10 – Evolution du nombre de Reynolds en fonction du temps pour les méthodes GFTSE (▲) et GFTSEB (■)

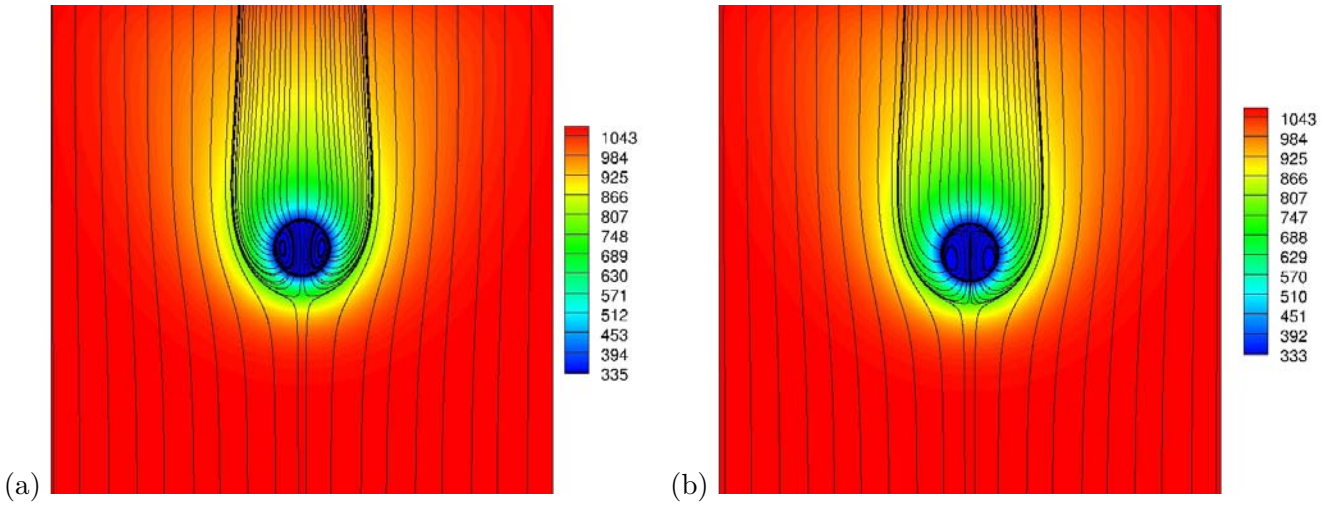



FIGURE 3.11 – Lignes de courant autour d'une goutte en mouvement et champ de température (en K) calculés avec la méthode GFTSEB (a) et GFTSE (b)

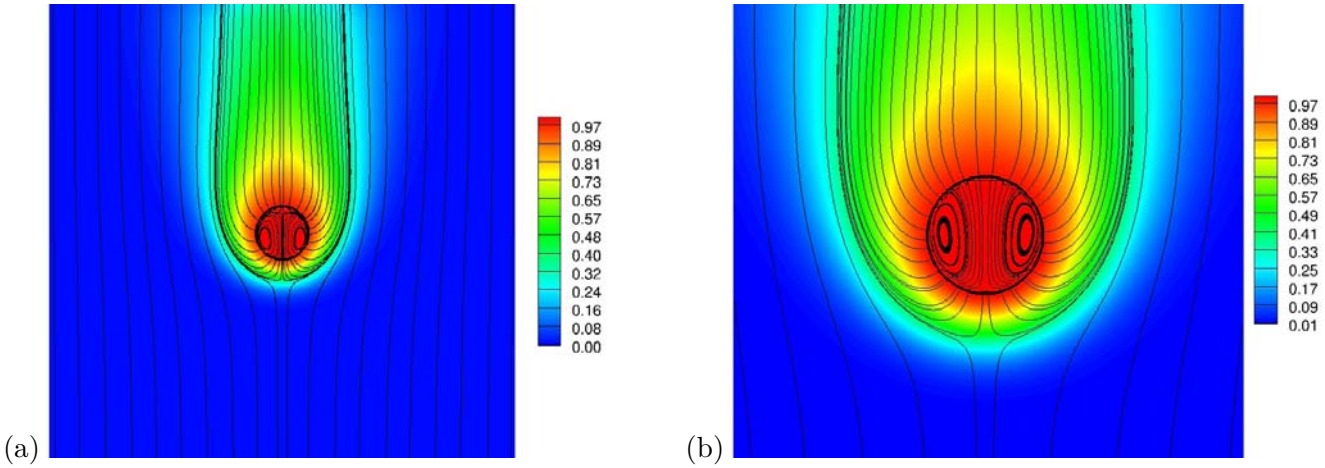



FIGURE 3.12 – Lignes de courant autour d'une goutte en mouvement et champ de fraction massique calculés avec la méthode GFTSEB (a) et zoom sur la goutte (b)

pour la méthode GFTSEB. La figure 3.12.b est un zoom de la figure 3.12.a qui permet de visualiser avec plus de précision, la discontinuité des lignes de courant à l'interface. Cette discontinuité est caractéristique de l'écoulement de Stefan généré par l'évaporation de la goutte.

Enfin, sur la figure 3.13, on peut visualiser les lignes de courant et le champ de température dans la goutte. Ce champ de température n'est pas homogène, de plus on peut visualiser clairement sur cette figure l'influence de la dynamique interne de la goutte (zone de recirculation) sur la répartition spatiale de la température (les isothermes ne sont pas concentriques comme cela serait le cas pour une goutte statique).

## 3.7 Etude de l'évaporation d'une goutte sur une paroi chauffée au-delà de la température d'ébullition du liquide considéré

Dans cette partie, nous nous intéressons à la vaporisation d'une goutte liquide posée sur une plaque chauffée à une température supérieure à la température d'ébullition du liquide. C'est un test particulièrement pertinent pour le nouvel algorithme GFTSEB développé dans cette étude, car il permettra de tester la stabilité de cet algorithme dans des situations ou le liquide est surchauffé.

Dans cette situation, la valeur de la température au niveau de la ligne triple qui s'est formée sur la paroi solide est singulière, puisque la condition de continuité de la température entre le fluide et le solide ne peut pas être respectée, si la température imposée en paroi dépasse la température d'ébullition du liquide. Notons cependant, que d'après [72] cette singularité thermique peut être relaxée théoriquement en résolvant la conduction thermique dans la paroi solide et en tenant compte de l'influence de la pression capillaire sur la température d'ébullition aux échelles submicrométriques.

L'algorithme GFTSE, également décrit dans cette étude et développé dans [96], s'est avéré foncièrement instable dans ce type de situations. En effet, lorsque l'on utilise cet algorithme, la température à l'interface n'est pas fixée par une condition de Dirichlet. Aussi, la discontinuité de température, entre l'interface liquide-gaz et le solide, au niveau de la ligne triple ne peut pas être capturée, ce qui conduit

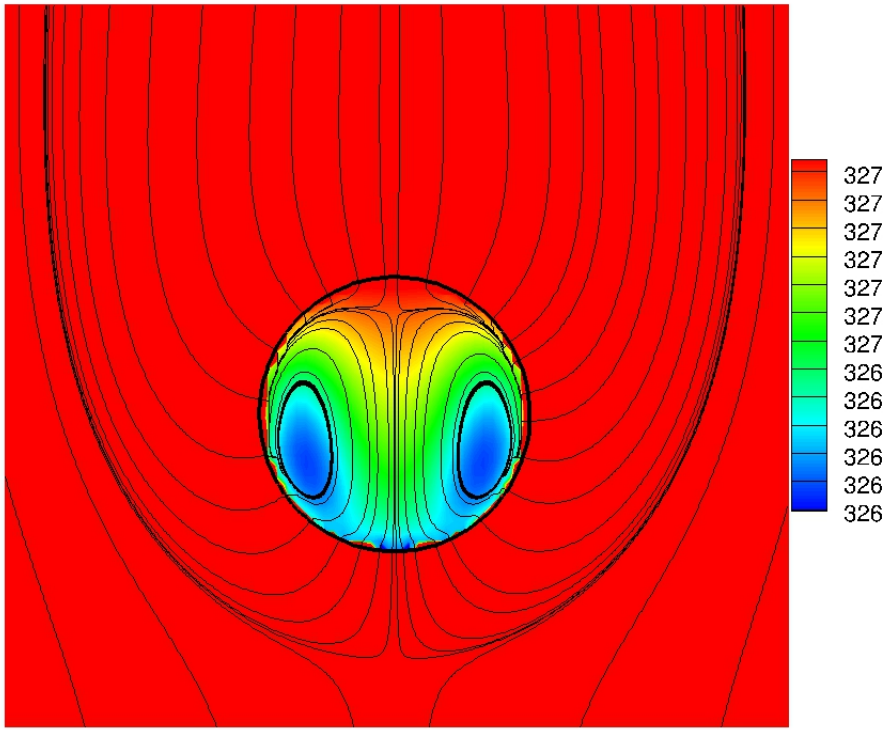



FIGURE 3.13 – Champ de température (en K) à l'intérieur de la goutte et lignes de courant

très rapidement à des valeurs de la température d'interface irréalistes au niveau de la ligne triple (au-delà de la température d'ébullition).

Si la température de l'interface dépasse la température d'ébullition (déséquilibre thermodynamique), la loi de Clausius Clapeyron ne peut plus être utilisée. Concrètement cela se manifeste dans les simulations par l'apparition de valeurs non-physiques pour la pression de vapeur saturante et donc pour la fraction massique à l'interface. Il s'ensuit des instabilités numériques et une divergence des simulations.

Les simulations présentées dans cette section ont pour unique objectif de mettre en évidence la stabilité de la méthode GFTSEB pour l'évaporation de gouttes posées sur une paroi chaude. En effet, le modèle physique proposé ici est insuffisant pour rendre compte de tous les phénomènes qui surviennent lorsque l'on s'intéresse au changement de phase au niveau d'une ligne triple. Il est notamment bien connu [72] que l'angle de contact apparent dépend fortement de la surchauffe entre la paroi et la température d'ébullition de la goutte et que des transferts thermiques intenses surviennent dans une micro-couche (submicrométrique). Par ailleurs, des travaux expérimentaux ont mis en évidence l'apparition de courants internes dans la goutte générés par le gradient de tension de surface à l'interface (convection Marangoni thermique). Tous ces effets complexes ne sont pas modélisés dans cette étude succincte, l'objectif, ici, est uniquement de mettre en évidence la robustesse et la stabilité de la méthode proposée dans une situation où la méthode GFTSE ne peut être utilisée.

Nous présentons une simulation pour une surchauffe entre la température de la plaque et la température d'ébullition de la goutte. La goutte de diamètre initial $D_0 = 1mm$ est initialement en chute libre sous l'effet de la gravité près de la paroi, une ligne triple se forme au moment du contact avec la paroi, puis la goutte oscille en s'évaporant.

Notons que les oscillations de la goutte sont liées à son inertie au moment de l'impact. La simulation est effectuée dans une configuration axisymétrique, les dimensions du domaine de calcul sont $l_r = 2D_0$ et $l_z = l_r$ , sur un maillage contenant $64 \times 64$ points de discrétisation. Les propriétés physiques des fluides sont rappelées dans le tableau 3.7 et correspondent approximativement aux propriétés de l'acétone dans de l'air.

Les résultats des simulations obtenus sont présentés sur les figures (3.14 , 3.15 et 3.16). L'évolution temporelle du carré du diamètre équivalent normalisé de la goutte est tracé sur la figure 3.14 jusqu'à un temps de simulation $t_f = 0.5s$ . Dans cette simulation, la réduction du diamètre de la goutte est d'environ 20%, ce qui correspond à une masse évaporée de l'ordre de 50%. Notons qu'à l'instar du cas test précédent (goutte en mouvement), le nombre d'itérations temporelles nécessaires pour effectuer cette simulation dans une situation très épurée est de l'ordre de 300 000.

Ceci s'explique par la nécessité de résoudre des échelles temporelles très différentes mettant en jeu des temps caractéristiques entre lesquels plusieurs ordres de grandeur existent (temps caractéristique des ondes capillaire << temps caractéristique de l'évaporation pour une goutte). C'est une difficulté récurrente rencontrée dans les simulations numériques directes d'évaporation de gouttes.

La courbe de régression du diamètre au carré 3.14, permet de distinguer clairement deux phases dans le régime d'évaporation. Dans la première phase la pente est plus prononcée alors que dans la seconde phase la régression du diamètre au carré semble linéaire, ce qui est une tendance caractéristique d'un régime d'évaporation établi pour une goutte.

Sur la Fig. 3.15, l'évolution temporelle de la température moyenne de la goutte a été tracée, on peut constater que cette température moyenne devient quasi-stationnaire et proche de $345K$ au bout d'un temps $t = 0.1s$ . On retrouve, là encore, une tendance connue caractérisant le régime établi d'évaporation d'une goutte.

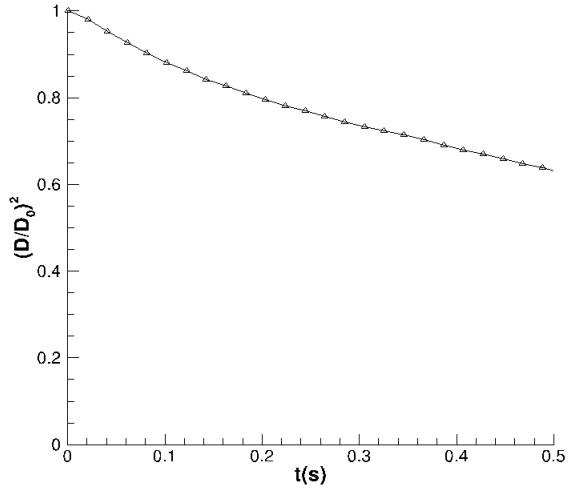



FIGURE 3.14 – Evolution temporelle du carré du diamètre normalisé de la goutte, maillage $64 \times 64$, $T_w = 400K$.

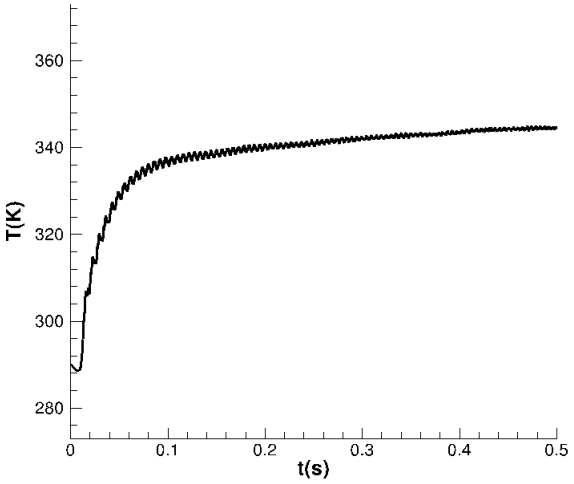



FIGURE 3.15 – Evolution temporelle de la température moyenne de la goutte, maillage $64 \times 64$, $T_w = 400K$.

Notons également que l'établissement du régime thermique (température quasi stationnaire) semble corrélé temporellement à la rupture de pente sur l'évolution du diamètre au carré. Ainsi lorsque la température d'équilibre est atteinte dans la goutte, l'évolution temporelle du diamètre au carré de la goutte tend vers une courbe linéaire.

Enfin, sur les Fig.3.16.a et 3.16.b, on peut visualiser un instantané des lignes de courant, de la position de l'interface, du champ de température et du champ de fraction massique. Les lignes de courant s'échappant radialement de l'interface sont la signature connue d'un écoulement de Stefan généré par l'évaporation.

Enfin, on remarquera également la structure du champ de température qui permet de visualiser très clairement, les points froids maintenus au niveau de la ligne triple malgré le contact avec une paroi dont la température dépasse la température d'ébullition. Cet exemple illustre bien l'intérêt de l'algorithme GFTSEB pour éviter un « overheating »au niveau de la ligne triple.

Ainsi, la méthode GFTSEB, développée dans cette étude, peut être utilisée comme un solveur de base approprié pour effectuer des études plus avancées sur ce sujet dans lesquelles une modélisation plus fine de la dynamique de l'angle de contact, du flux d'évaporation au niveau de la ligne triple et de la convection Marangoni devrait être incorporée.

La stabilité de l'algorithme GFTSEB a également été testée avec succès pour des surchauffes bien plus importantes. Les résultats obtenus ne sont cependant pas présentés dans cette thèse car la modélisation présentée est bien trop simpliste pour rendre compte des phénomènes physiques survenant dans des situations aussi extrêmes (apparition de germes de nucléation voire disparition de la ligne triple dans le cas d'une transition vers la vaporisation en régime de Leidenfrost).

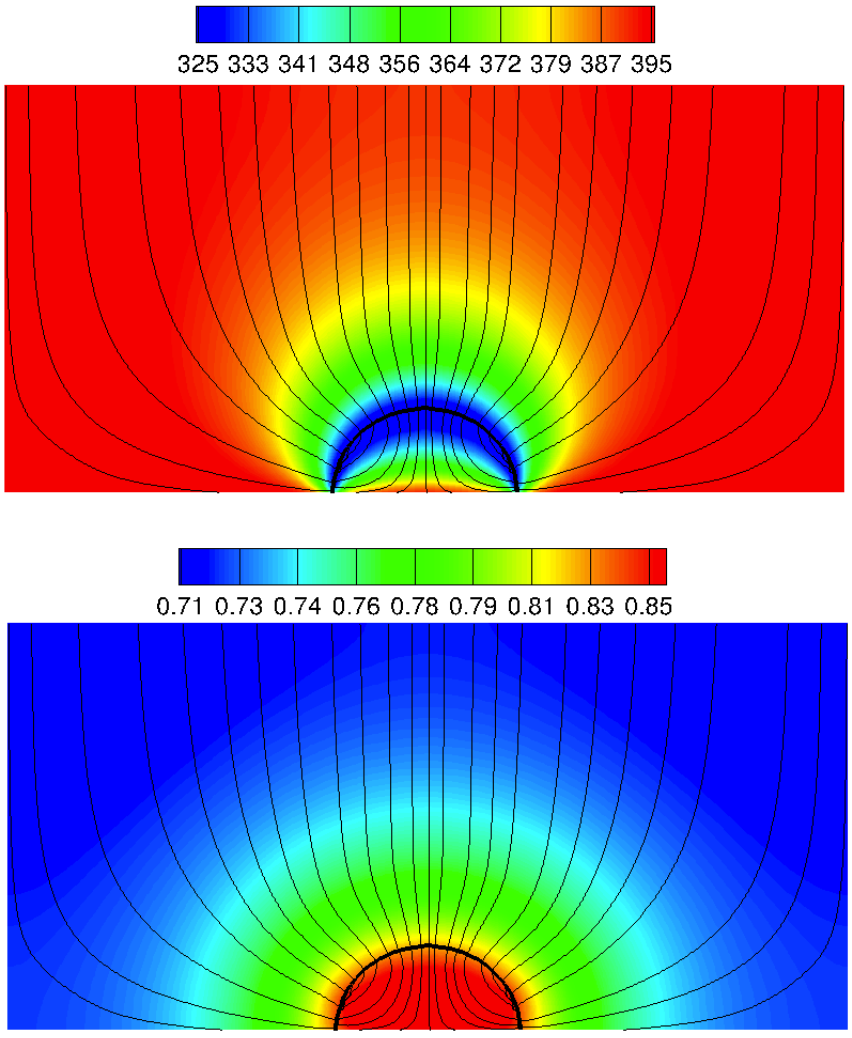



FIGURE 3.16 – Instantané des lignes de courant, de la position de l'interface et du champ de température (en K) (a) ou du champ de fraction massique (b), maillage $64 \times 64$, $T_w = 400K$.

Chapitre 4

# Simulation Numérique directe axisymétrique de l'impact d'une goutte sur une paroi chaude

**Sommaire**


4.1 **Impact d'une goutte à $We = 7.4$** . . . . . 129
4.2 **Impact d'une goutte à $We = 25.2$** . . . . . 138
4.3 **Impact d'une goutte à $We = 44.8$** . . . . . 145
4.4 **Comparaison des résultats** . . . . . 150


L'objectif de ce chapitre est de montrer et d'analyser les résultats des simulations numériques de l'impact de gouttes sur des parois chaudes. Les simulations ont été effectuées avec l'algorithme GFTSEB développé et implémenté dans le code $\mathcal{DIVA}$ au cours de cette thèse (présenté dans le chapitre 3).

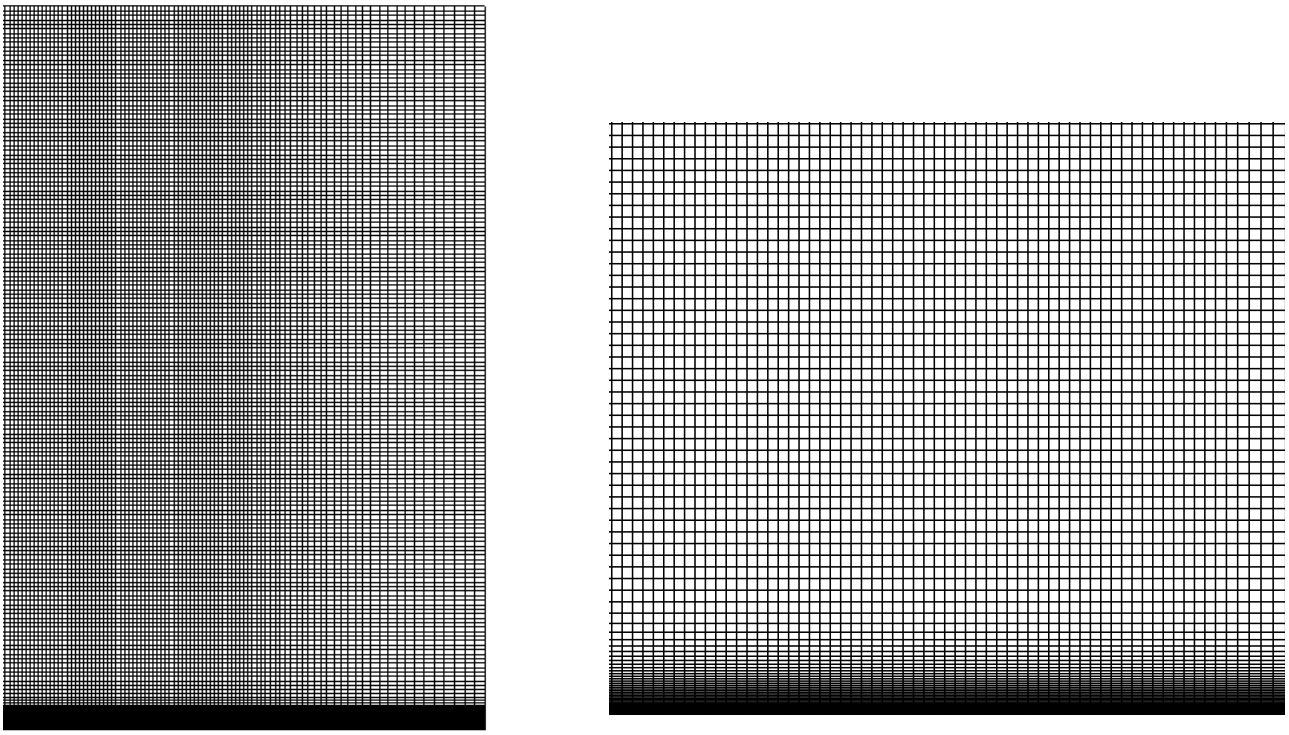
Comme les simulations sont effectuées dans une configuration axisymétrique, seuls les cas de rebonds axisymétriques sont étudiés (voir Fig. 1.4) et comparés aux expériences. Trois cas d'impacts à différents nombres de Weber seront exposés. Dans la première partie, l'étude hydrodynamique et thermique de l'impact simple (ou réflexion) à $We = 7.4$ est effectuée.

L'impact pour lequel le nombre de Weber $We = 25.2$ est présenté dans la deuxième partie de ce chapitre. L'intérêt de ce cas réside dans le fait qu'il se situe dans la zone de transition entre la réflexion et le rebond avec une goutte satellite (*Cf* Fig. 1.7). Comme dans le cas précédent, le comportement de la goutte et son interaction avec la paroi est analysé. L'impact à $We = 44.8$ du rebond d'une goutte avec la création d'une goutte satellite fait l'objet de la troisième partie.

La dernière partie a pour objectif de comparer les résultats des simulations numériques avec l'étude expérimentale faite par *Dunand* [20] dans les mêmes conditions. La confrontation des résultats obtenus pour les impacts à $We = 7.4$ et à $We = 44.8$ est également effectué.

## 4.1 Impact d'une goutte à $We = 7.4$

Le premier cas étudié est l'impact d'une goutte d'eau à 290K sur une paroi à 800K. Le diamètre initial de la goutte est de $D_0 = 130\mu m$ et elle impacte la paroi avec une vitesse $\vec{V_0} = -2\ \vec{e}_z\ m.s^{-1}$. Les propriétés de l'air et de l'eau utilisées pour les calculs sont listées dans le tableau 4.1. Dans le code $\mathcal{DIVA}$. les propriétes physiques des fluides sont supposées constantes bien qu'en réalité, certaines d'entre elles dépendent de la température (c'est pourquoi des valeurs moyennes sont utilisées).



1. 2.

FIGURE 4.1 – Maillage $96 \times 192$ non uniforme raffiné à la paroi et près de l'axe $\vec{e}_z$ (1) et zoom sur la zone proche de la paroi (2)

| Fluide | $\rho$ | $\mu$ | $C_p$ | $\kappa$ | $\sigma$ | $T^B$ | $h_{lg}$ | $D_m$ | $M$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Eau (liquide) | 1000 | $0,00113$ | 4180 | 0.6 | 0.07 | 373 | 2300000 | $2.10^{-5}$ | $18.10^{-3}$ |
| Air (gaz) | $1,226$ | $0,00003$ | 1000 | $0,046$ | - | - | - | - | $28,97.10^{-3}$ |

TABLE 4.1 – Propriété des fluides en unités SI

Comme le montre la figure 4.1, la simulation a été effectuée à l'aide d'un maillage non uniforme avec une concentration de mailles plus forte dans la zone proche de la paroi de telle sorte que le film de vapeur soit résolu avec une dizaine de mailles au minimum. Le nombre de mailles suivant la direction $\vec{e}_x$ vaut $N_x = 96$ et la zone est divisée en deux parties : entre $x = 0$ et $x = 0.5\ l_x$ le maillage est uniforme suivant $\vec{e}_x$ (le pas d'espace $\Delta x_i$ est constant) et comprend 60 mailles. Entre $x = 0.5\ l_x$ et $x = l_x$ le pas d'espace $\Delta x_i$ est de plus en plus grand et la zone comprend 36 mailles dans la direction $\vec{e}_x$.

Le nombre de mailles suivant $\vec{e}_z$ vaut $N_z = 192$ et la zone est également divisée en deux parties : entre $z = -0.5 l_z$ et $x = -(0.5 - 0.06)\ l_z$ le maillage est déraffiné suivant $\vec{e}_z$ (le pas d'espace $\Delta z_k$ est de plus en plus grand) et comprend 40 mailles. Entre $z = -(0.5 - 0.06)\ l_z$ et $z = 0.5\ l_z$ le pas d'espace $\Delta z_k$

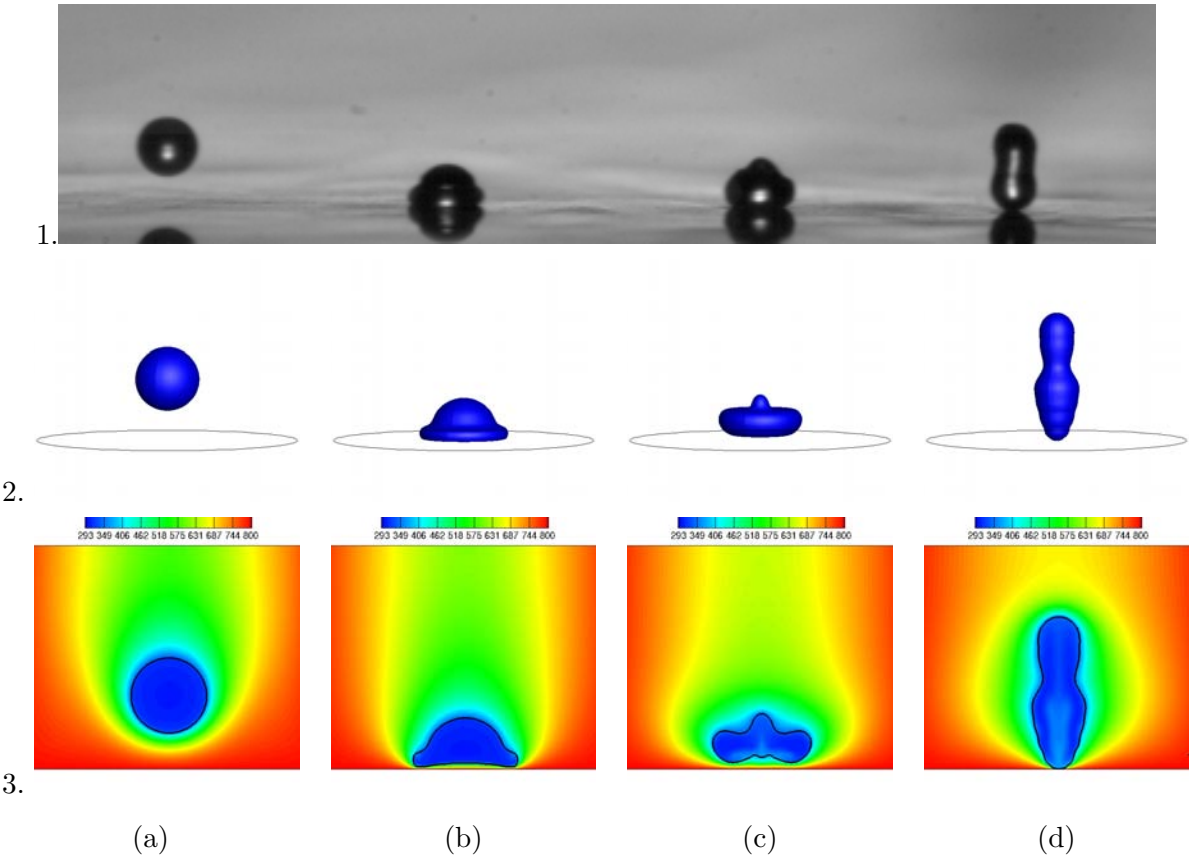



FIGURE 4.2 – Images expérimentales, visualisation 3D et profil de température d'une simulation 2D axi-symétrique du rebond d'une goutte impactant une surface chaude à We=7.4 en régime Leidenfrost

est constant et la zone comprend 152 mailles dans la direction $\vec{e}_z$.

Même si le maillage est fortement raffiné à la paroi, la transition entre les zones raffinées et uniformes est continue afin de préserver une bonne qualité de discrétisation spatiale. Le domaine de calcul est fonction du diamètre de la goutte : $l_x = 2\ D_0$ et $l_z = 1,5\ l_x$. La méthode de Runge-Kutta d'ordre 2 est utilisée pour la discrétisation temporelle.

La figure 4.2 représente trois séries d'images correspondant respectivement à l'expérience réalisée par *Dunand* [20] sur un train de gouttes dont le Weber normal vaut 7.4 ; une visualisation 3D de la simulation numérique que nous avons effectuée et le champ de température calculé par la simulation.

Les images montrent que la forme de la goutte lors de l'impact avec la paroi est bien reproduite par la simulation numérique. Lors de l'impact, la goutte conserve sa forme sphérique au dessus et s'étale dans la partie inférieure en prenant la forme d'un chapeau melon (images 1b et 2b). Le liquide dans la partie supérieure s'étale ensuite (images 1c et 2c) et la goutte prend alors la forme d'un chapeau mexicain de mariachis. Elle se recompacte finalement (images 1d 2d et 3d) et une légère différence est observée entre la simulation numérique et l'expérience puisque dans la première la goutte ressemble à une quille de bowling (image 3d) et la deuxième à une forme de cacahouette beaucoup plus symétrique par rapport au plan normal à l'axe $\vec{e}_z$ (image 1d).

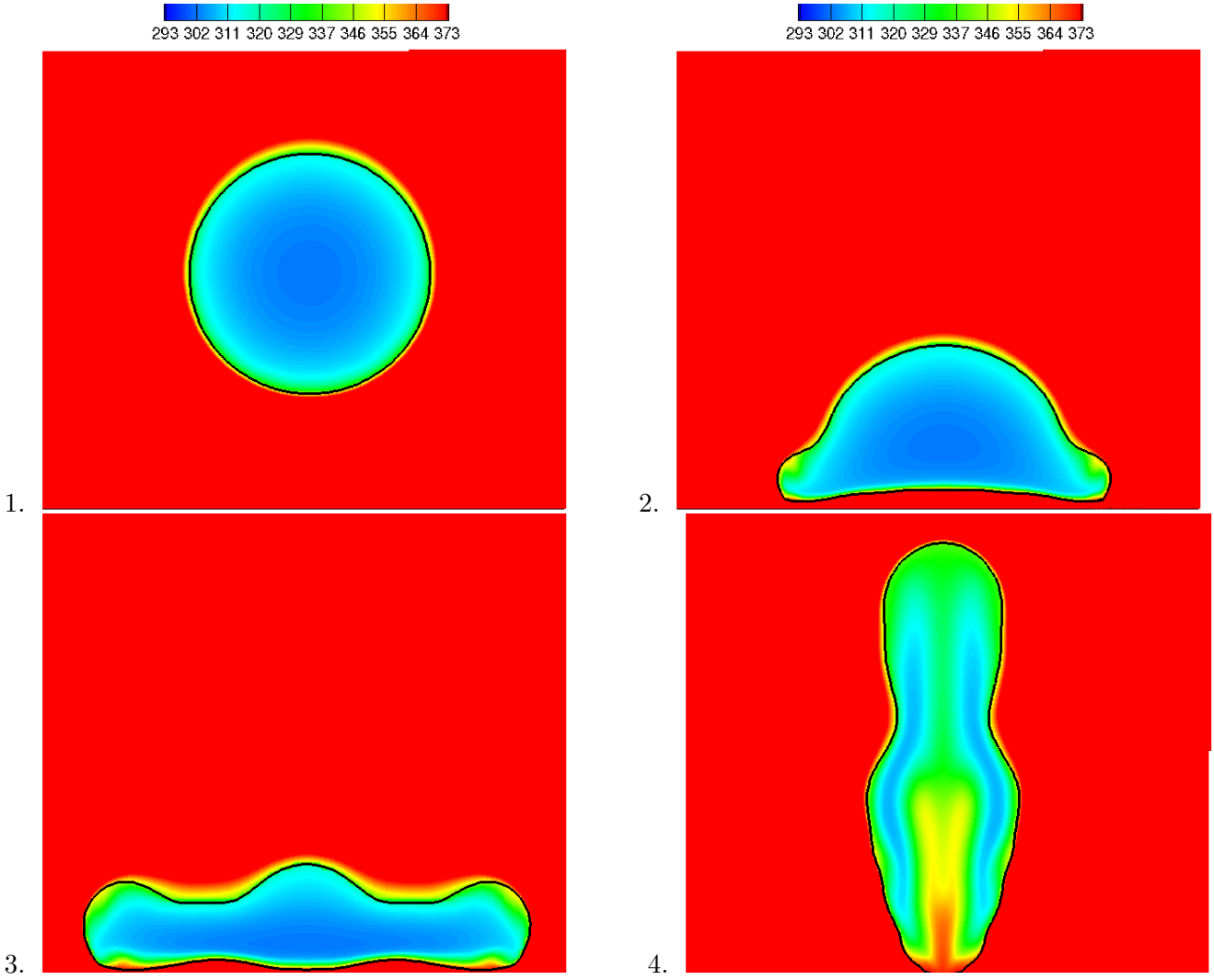



FIGURE 4.3 – Champ de température en K d'une goutte d'eau impactant une paroi à 800K à $We = 7.4$

La troisième série de la figure 4.2 montre qu'avant l'impact la goutte refroidit le gaz sur son passage puisque celui ci est à 800K et elle est initialement à 300K (image 3a). Le sillage « froid » laissé par la goutte se réchauffe au cours de l'impact car les conditions aux limites dans la simulation imposent un échauffement permanent de l'air environnant (images 3b,3c et 3d), avec des conditions de Dirichlet sur les bords du domaine.

Le champ de température dans le gaz montre le fort gradient thermique entre la goutte et la paroi : en l'espace de quelques microns, elle passe de $800K$ à $300K$ tandis que dans la partie supérieure le gradient thermique est bien plus faible.

La figure 4.3 montre le champ de température à l'intérieur de la goutte à différents instants de l'impact. Comme le montrent les images, cette température n'est pas constante comme il est souvent supposé et elle peut même varier de plusieurs dizaines de degrés (image 4) au sein de la goutte.

Dans la première image, les isocontours des températures sont concentriques avec un léger décalage

dû à la chute de la goutte. Pendant la phase d'étalement de la goutte sur la paroi (images 2 et 3), les isocontours de température suivent la forme de la goutte qui s'échauffe. Lorsqu'elle se recompacte, se distinguent des structures particulières liées à la dynamique interne de la goutte pendant le rebond (image 4).

Dans le code $\mathcal{DIVA}$, le champ de fraction massique n'est calculé que dans le gaz car le liquide est supposé pur. C'est donc le champ de fraction massique de la vapeur d'eau qui se mélange au gaz initialement pur et son extension dans le liquide qui sont représentés dans la figure 4.4. L'extension du champ de fraction massique est effectuée avec la méthode de *Aslam* détaillée dans le chap. 3. L'extension de ce champ est linéaire.

Dans l'image 4.4.1 la fraction massique de vapeur est faible ($Y_m \sim 0,12$) et le sillage a une forme ovale. Dans l'image 4.4.2 juste avant l'étalement, le gradient de fraction massique dans la partie inférieure de la goutte augmente fortement mais il reste faible dans la partie supérieure. Au cours de l'étalement (images 3 et 4) le film est saturé en vapeur d'eau (régime d'ébullition) et la goutte continue de s'évaporer dans la partie supérieure (régime d'évaporation).

Finalement, lorsque la goutte se recompacte, l'épaisseur du film augmente par endroits (images 5 et 6) et la vapeur d'eau se dégage du film entre la goutte et la paroi. Dans les extrémités inférieures de la goutte le film est encore saturé de vapeur d'eau et dans le centre du film, la concentration de vapeur d'eau est moins importante.

Les images montrent que la fraction massique de vapeur d'eau est bien plus importante dans le film que dans la partie supérieure de la goutte. En effet, dans la partie supérieure, le gradient thermique est moins important donc la goutte se vaporise moins et la vapeur formée peut se diluer dans le gaz environnant.

En revanche, le gradient thermique est beaucoup plus fort entre la partie inférieure de la goutte et la paroi ce qui entraîne une augmentation importante du taux de vaporisation à cet endroit. La vapeur d'eau chasse l'air du film qui est ensuite continuellement alimenté en vapeur d'eau saturée. Le débit d'ébullition génère une augmentation de la pression dans le film qui est à l'origine de la force de sustentation qui empêche le contact entre la goutte et la paroi.

La figure 4.4 montre que le film entre la goutte et la paroi est saturé de vapeur d'eau dans les premiers moments de l'impact alors que dans la partie supérieure de la goutte, la vapeur n'est pas saturée. La simulation de cette structure n'a été possible que grâce au nouvel algorithme GFTSEB développé au cours de cette thèse puisque la goutte est dans le régime d'ébullition dans le film de vapeur et en régime d'évaporation au dessus.

Le champ de vitesses dans le film de vapeur séparant la goutte et la paroi est représenté dans la figure 4.5. La première image est prise juste avant l'impact : la couche limite des vitesses dans la zone proche de la paroi est bien résolue. En effet, la vitesse est nulle à la paroi et augmente avec un profil parabolique. L'écoulement peut être assimilé à un écoulement de Poiseuille avec une disymétrie du fait de la vaporisation de la goutte. Dans la figure ne sont représentés qu'un vecteur vitesse sur 4 pour plus de lisibilité.

Dans la deuxième image, la goutte commence à s'étaler sur la paroi : le film de vapeur est très fin et les vitesses de la phase vapeur peuvent atteindre jusqu'à $40m.s^{-1}$. Si l'écoulement reste parallèle pendant la phase d'étalement (images 3 et 4) avec des vitesses atteignant $15m.s^{-1}$, ce n'est plus le cas lorsque la goutte se recompacte. Les images 5 et 6 montrent que le sens de l'écoulement s'inverse dans la phase de compactage puisque le film est entrainé par la goutte. Ces images permettent de montrer que la loi de Poiseuille (souvent utilisé pour modéliser les vitesses dans le film de vapeur) n'est pas toujours

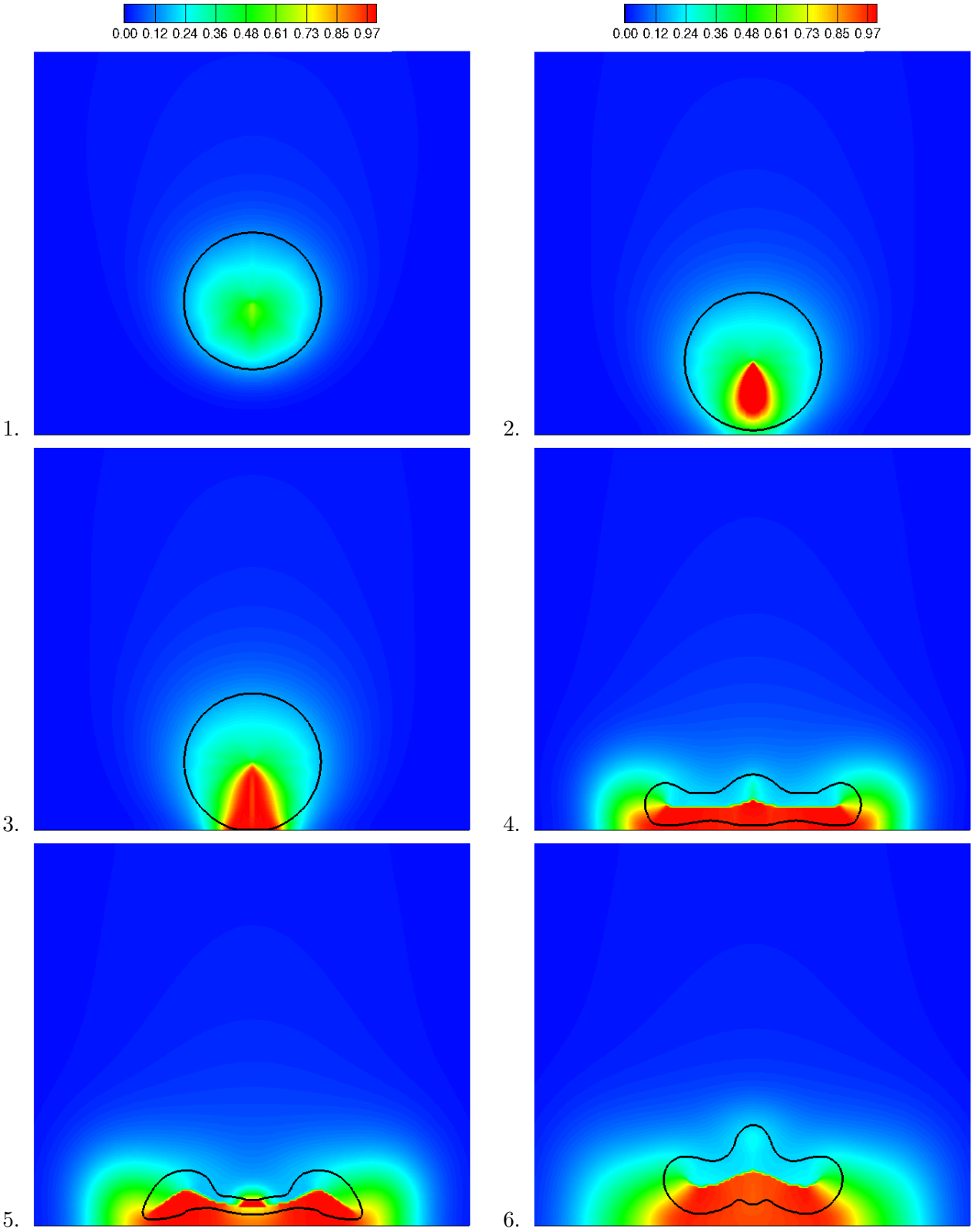



FIGURE 4.4 – Champ de fraction massique d'une goutte d'eau impactant une paroi à 800K à $We = 7.4$

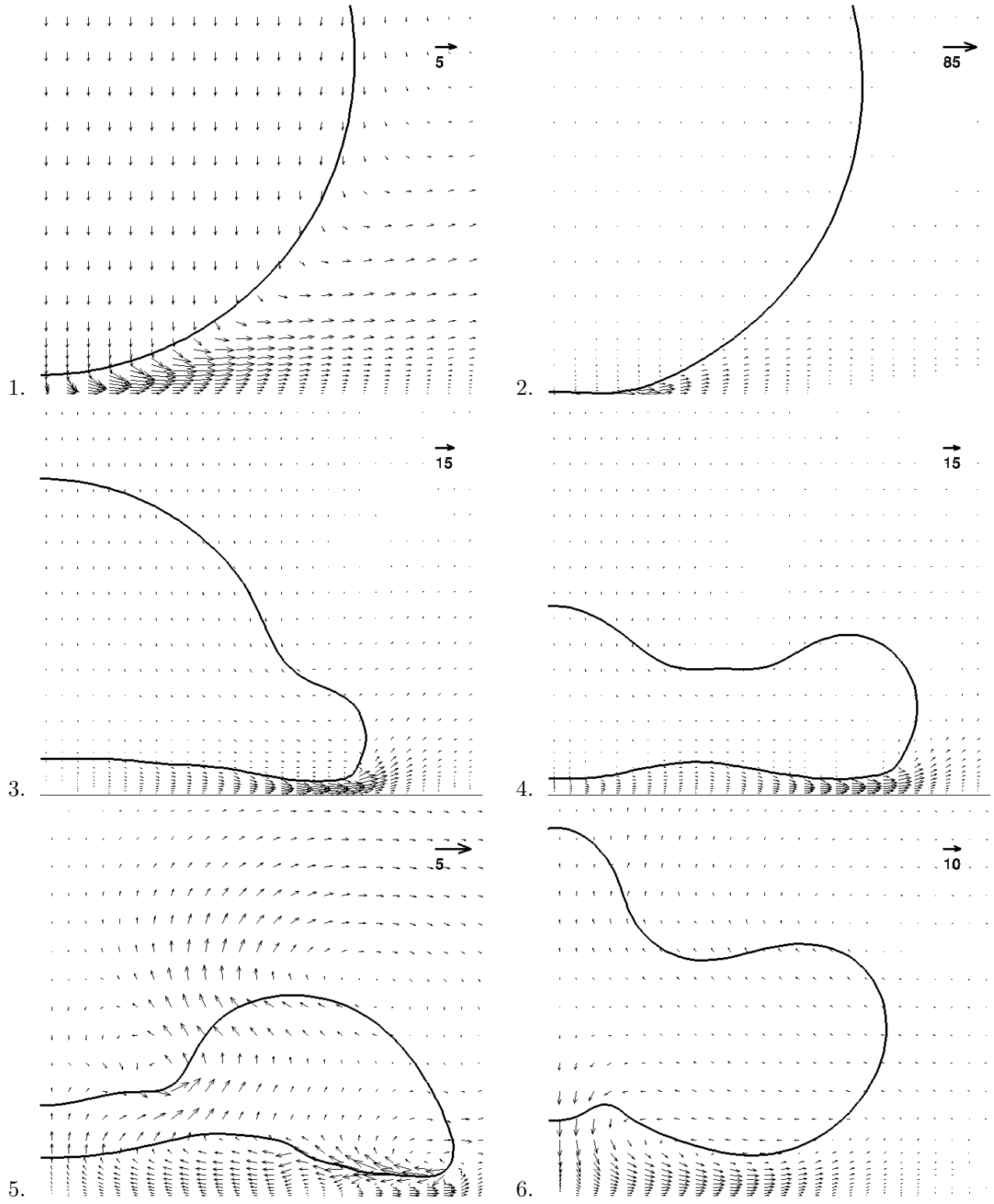



FIGURE 4.5 – Champ de vitesses en $m.s^{-1}$ d'une goutte d'eau impactant une paroi à 800K à $We = 7.4$

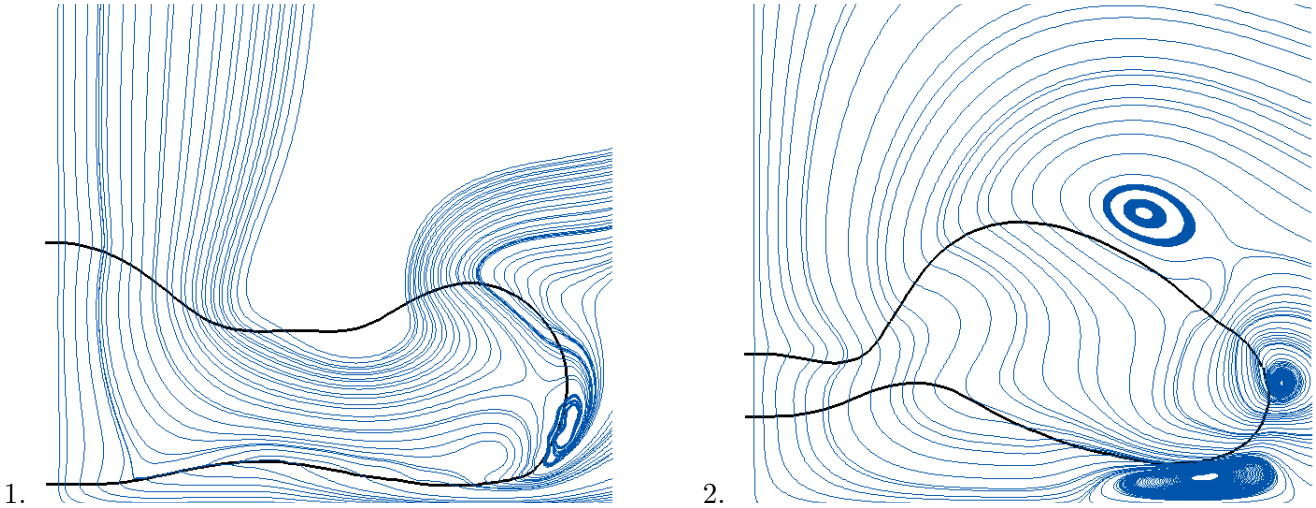


FIGURE 4.6 – Lignes de courant dans une goutte d'eau lors de son impact sur une paroi à 800K à $We = 7.4$

représentative de l'écoulement entre la goutte et la paroi.

Les lignes de courant lors de l'étalement de la goutte (image 1) et au moment où elle se recompacte (image 2) sont tracées dans la figure 4.6. Pendant la phase d'étalement les lignes de courant sont parallèles dans le film de vapeur et dans le sillage : l'écoulement est parallèle. Ce n'est pas le cas dans la goutte et notamment dans les extrémités puisqu'une petite zone de recirculation est visible dans la partie inférieure droite de la goutte.

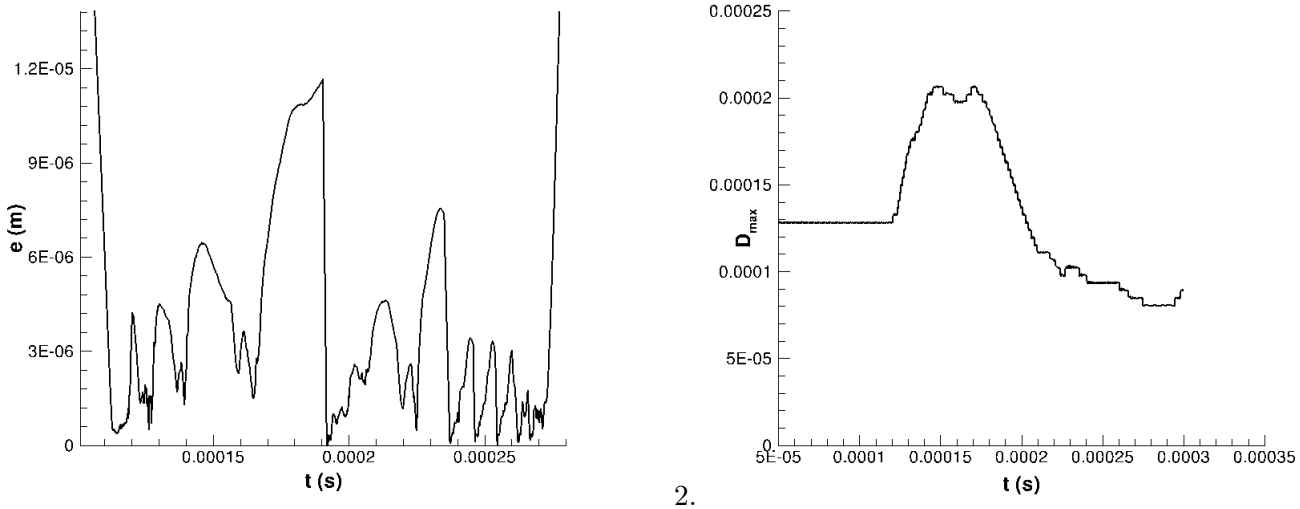
Pendant la phase où la goutte se recompacte, les lignes de courant sont toujours parallèles dans la partie centrale du film de vapeur mais une zone de recirculation se forme à l'extrémité. Deux autres zones de recirculation de l'écoulement se forment également dans l'extrémité supérieure. Ce qui confirme que l'écoulement n'est pas parallèle partout ni à tous les instants.

Dans la figure 4.7 sont tracés l'épaisseur minimale du film de vapeur et le diamètre d'étalement au cours du temps. L'épaisseur du film de vapeur oscille pendant l'impact. La courbe permet de déduire l'instant auquel l'impact a eu lieu $t_i$ et l'instant où elle décolle de la paroi $t_d$ : $t_i = 1,1.10^{-4}s$ et $t_d = 2,75.10^{-4}s$.

L'épaisseur moyenne du film est de l'ordre de $3\mu m$ soit 40 fois moins que son diamètre initial d'où la difficulté de l'évaluer de façon expérimentale ainsi que de réaliser des simulations numériques directes. En effet, réaliser des simulations numériques en résolvant à la fois l'écoulement dans la couche de vapeur et à l'échelle de la goutte suppose d'utiliser des maillages très fins par endroits ce qui entraine des contraintes strictes sur les pas de temps : c'est un problème multi-échelle.

La courbe 4.7.2 montre l'évolution temporelle du diamètre d'étalement qui correspond à la distance entre l'axe $\vec{e}_z$ et le point du liquide le plus éloigné. Le diamètre d'étalement est constant avant l'impact et correspond au diamètre initial de la goutte. Lorsque la goutte s'étale, il augmente jusqu'à atteindre une valeur maximale $D_{max} \sim 2,1.10^{-4}m$ qu'il va conserver durant quelques instants. Cette valeur maximale vaut presque 60% de plus que le diamètre initial. Le diamètre va ensuite diminuer lorsque la goutte se recompacte à partir de l'instant $t_{etal} = 1,7.10^{-4}$.

Les instants $t_i, t_d$ et $t_{etal}$ sont très important car ils permettent de caractériser les courbes de la figure




1. 2.

FIGURE 4.7 – Evolution au cours du temps de l'épaisseur du film de vapeur et du diamètre d'étalement (en m) d'une goutte impactant une paroi à 800K et à $We = 7.4$

4.8 qui représentent l'évolution du nombre de Reynolds et du diamètre équivalent de la goutte au cours du temps.

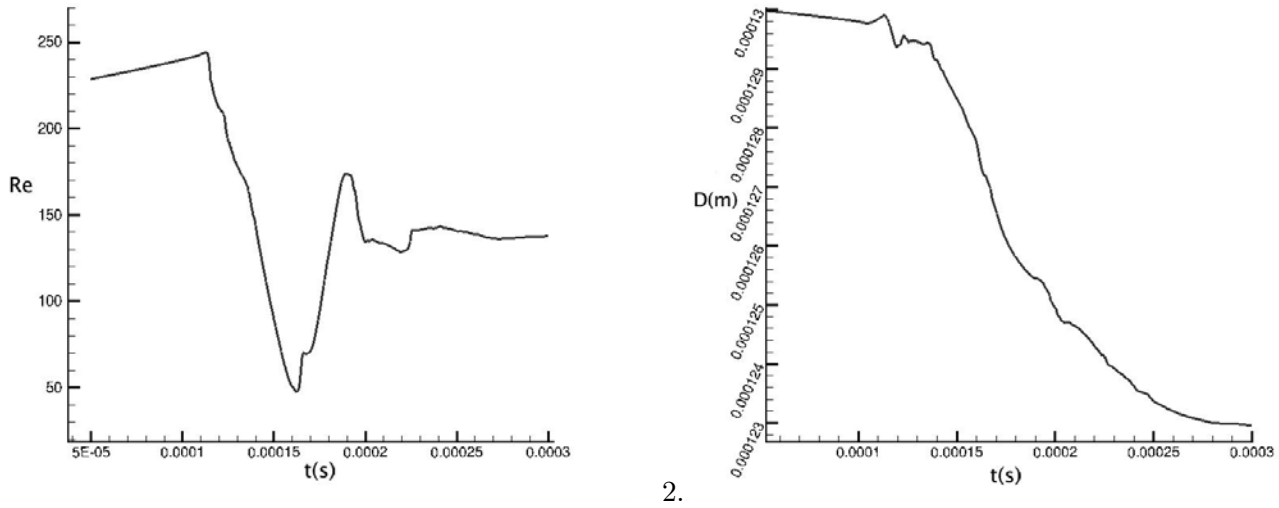
La courbe 4.8.1 montre que le nombre de Reynolds diminue drastiquement entre le premier instant de l'impact $t = t_i$ et le dernier instant de l'étalement maximal de la goutte soit $t = t_{etal}$. Il augmente ensuite lorsque la goutte se recompacte et après quelques oscillations se stabilise à une valeur inférieure de presque 40% de sa valeur initiale.

Comme attendu, le diamètre equivalent diminue au cours du temps (*Cf* Fig. 4.8.2). En fait, ce paramètre caractérise la perte du volume de la goutte au cours du temps :

$$D_{eq} = \sqrt[3]{\frac{6\ \mathcal{V}_{goutte}}{\pi}}$$

$D_{eq}$ diminue faiblement avant l'instant $t_i$ puis sa diminution est beaucoup plus importante entre $t_i$ et $t_d$ avant de converger vers une valeur constante. En effet, c'est au moment de l'impact que les échanges thermiques sont les plus importants. Comme le montre l'image, le diamètre varie de $5,4\%$ par rapport à sa valeur initiale.

En conclusion, cette étude de l'impact d'une goutte d'eau sur une paroi chaude en régime de Leidenfrost à petit Weber a permis de modéliser des phénomènes déja observés lors des expériences (la formation d'une couche de vapeur sous la goutte, la perte de la quantité de mouvement) mais aussi de modérer certaines hypothèses faites dans les études citées au chapitre 1 comme la saturation permanente du film de vapeur ou l'écoulement de Poiseuille sous la goutte. L'étude suivante est effectuée avec une vitesse normale plus importante afin de tester le solveur dans d'autres conditions dynamiques.




1. 2.

FIGURE 4.8 – Evolution au cours du temps du nombre de Reynolds et du diamètre equivalent d'une goutte impactant une paroi à 800K et à $We = 7.4$

## 4.2 Impact d'une goutte à $We = 25.2$

Le cas étudié par la suite, est l'impact d'une goutte d'eau (*Cf* tab. 4.1) de diamètre initial $D_0 = 133\mu m$ à 300K, avec une vitesse d'impact $\vec{V_0} = -3,7\ \vec{e_z}\ m.s^{-1}$ sur une surface à 746K. Comme pour le cas précédent, la simulation est réalisée à l'aide d'un maillage non-uniforme avec une concentration de mailles plus importante dans la zone proche de la paroi. Comme l'étirement de la goutte après le rebond est plus important, le domaine de calcul est augmenté de sorte que : $l_x = 2\ D_0$ et $l_z = 3\ l_x$. Le domaine étant plus grand dans la direction $\vec{e_z}$, le nombre de mailles est plus important. Suivant la direction $\vec{e_x}$ il vaut $N_x = 96$ et la zone est divisée en deux parties : entre $x = 0$ et $x = 0.5\ l_x$ le maillage est uniforme suivant $\vec{e_x}$ (le pas d'espace $\Delta x_i$ est constant) et comprend 60 mailles. Entre $x = 0.5\ l_x$ et $x = l_x$ le pas d'espace $\Delta x_i$ est de plus en plus grand et la zone comprend 36 mailles dans la direction $\vec{e_x}$.

Le nombre de mailles suivant $\vec{e_z}$ vaut $N_z = 384$ et la zone est également divisée en deux parties : entre $z = -0.5 l_z$ et $x = -(0.5 - 0.06)\ l_z$ le maillage est déraffiné suivant $\vec{e_z}$ (le pas d'espace $\Delta z_k$ est de plus en plus grand) et comprend 120 mailles. Entre $z = -(0.5 - 0.06)\ l_z$ et $z = 0.5\ l_z$ le pas d'espace $\Delta z_k$ est constant et la zone comprend 264 mailles dans la direction $\vec{e_z}$. Afin de préserver une bonne qualité de discrétisation spatiale, la transition entre les zones raffinées et uniformes sont continues.

La figure 4.10 représente trois séries d'images dont une expérience réalisée par *Dunand* [20] d'un train de gouttes impactant une surface à 746K avec un nombre de Weber valant $We = 25.2$ ; une visualisation tridimensionnelle de la simulation numérique 2D-axisymétrique de l'impact d'une goutte d'eau dans les mêmes conditions expérimentales et le champ de température calculé par le code $\mathcal{DIVA}$.

Avant l'impact, la goutte conserve sa forme sphérique (images 1a, 1b, 2a, 2b,3a,3b), puis elle s'étale sur la paroi en formant une couronne reliée par une mince couche de liquide (images 1c, 2c, 3c) pour finalement s'étirer dans la direction $\vec{e_z}$ et décoller. Le sillage « froid » observé pour l'impact à $We = 7.4$ est également visible dans la série 4.10.3.

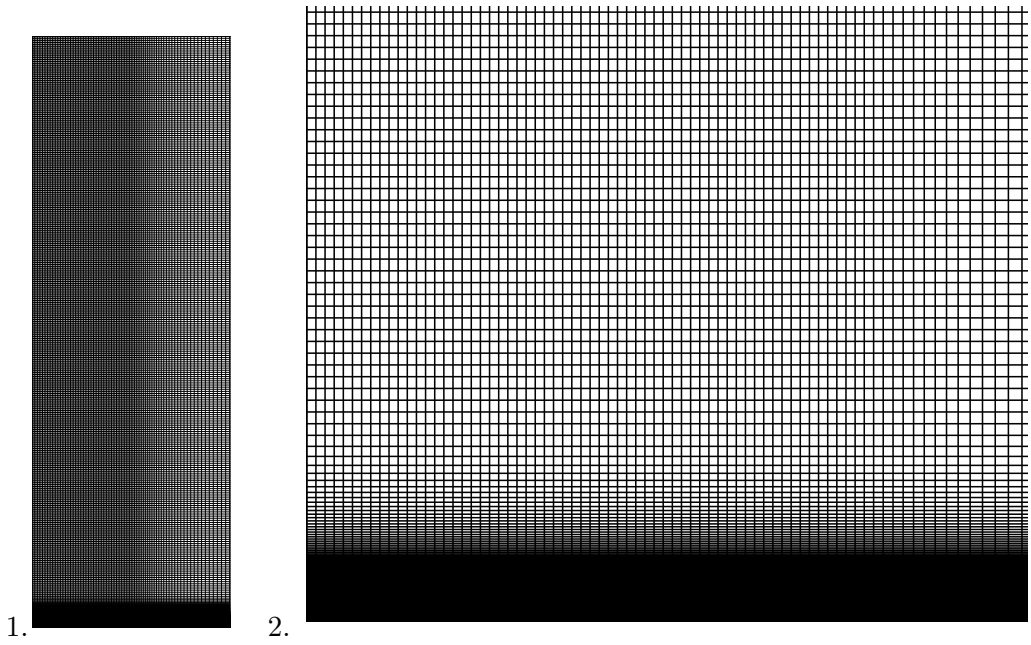



FIGURE 4.9 – Maillage $96 \times 384$ non uniforme raffiné à la paroi et près de l'axe $\vec{e}_z$

La simulation reproduit correctement les deux derniers moments de l'impact avec toutefois de légères différences de forme : dans les expériences, le centre de masse de la goutte est proche de la partie inférieure (images 1d et 1e) tandis que dans les simulations, le liquide est mieux réparti.

De plus, dans la dernière image expérimentale, la formation d'une goutte satellite est pressentie alors que dans la simulation ce n'est pas le cas. Ceci est dû au fait que l'impact se situe dans la zone de transition de régime de rebond sans et avec une goutte satellite donc la goutte ne se forme pas dans tous les cas, ce qui est confirmé par les images de la figure 4.11.

La figure 4.11 montre plusieurs trains de gouttes impactant une paroi dans les mêmes conditions expérimentales que la figure 4.10. Si dans la série (c) la goutte satellite se forme clairement, dans les séries (a) et (b) ce n'est qu'une supposition même si la forme de la goutte après l'impact semble le confirmer puisque les deux parties de la goutte ne sont reliées que par un très mince filet d'eau. Quant à la série (d), la goutte satellite ne se forme pas.

La figure 4.12 montre le champ de température de la goutte pour quatre moments clefs de l'impact. Dans l'image 1, les isocontours de température sont concentriques avec un léger décalage dû à la chute de la goutte de sorte que le liquide de la partie inférieure de la goutte est plus chaud qu'au dessus même avant l'impact.

Dans la deuxième image, la goutte prend la forme de chapeau melon qui a déjà été observée pour l'impact à $We = 7.4$ mais les bords sont beaucoup plus fins et à cet instant encore, les isocontours de température suivent la forme de la goutte. Dans la figure 4.12.3 l'étalement maximal de la goutte est atteint et la température varie de presque 60K. Des structures particulières dûes à l'écoulement dans la goutte sont également visibles dans les images 3 et 4. La figure 4.11 montre également que l'étalement de la goutte sur le film de vapeur est plus important que pour l'impact à $We = 7.4$.

Le champ de fraction massique de vapeur d'eau est représenté dans la figure 4.13. La première image

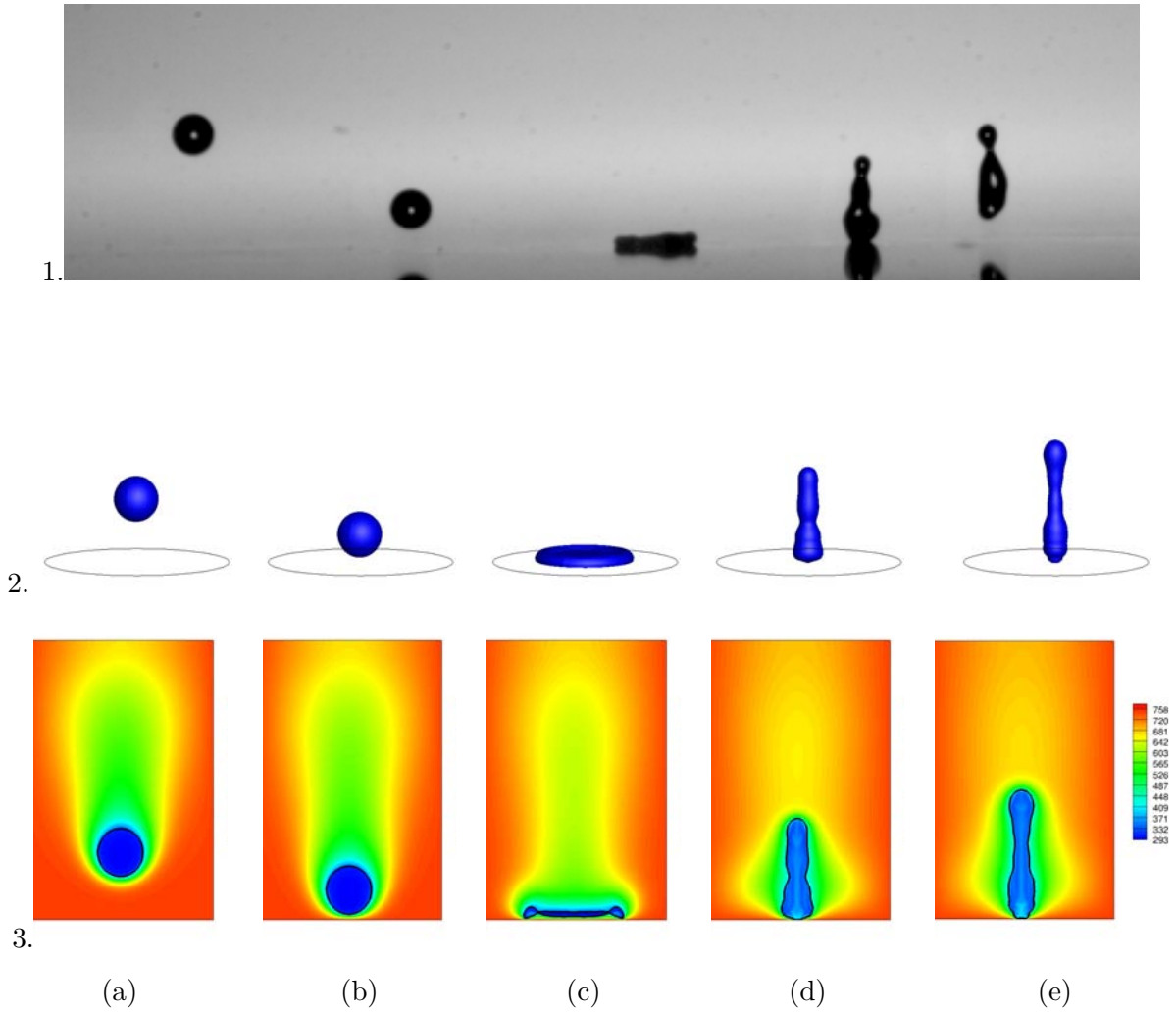



FIGURE 4.10 – Images expérimentales, visualisation 3D et profil de température d'une simulation 2D axi-symétrique du rebond d'une goutte impactant une surface chaude à We=25.2 en régime Leidenfrost

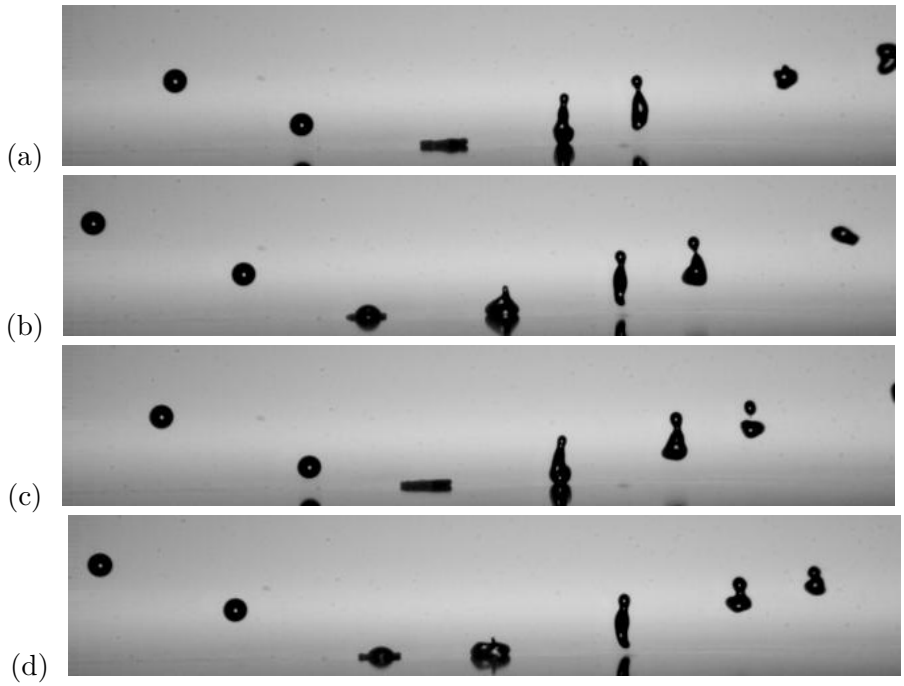
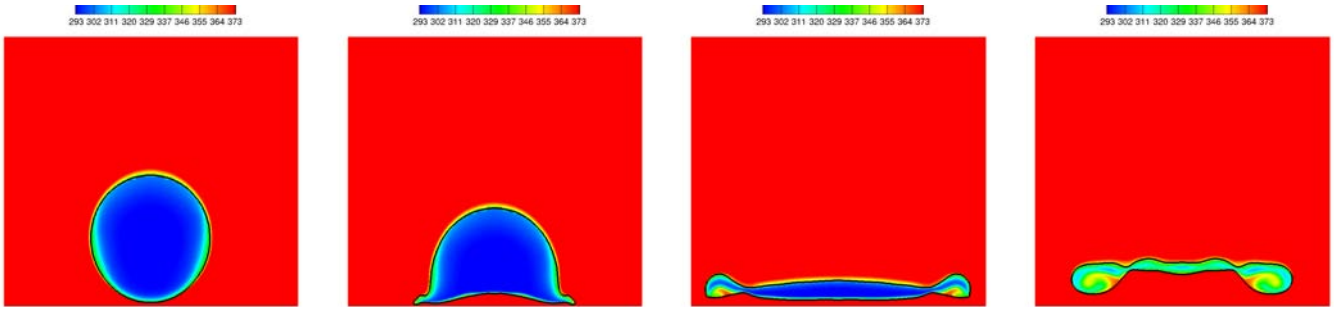
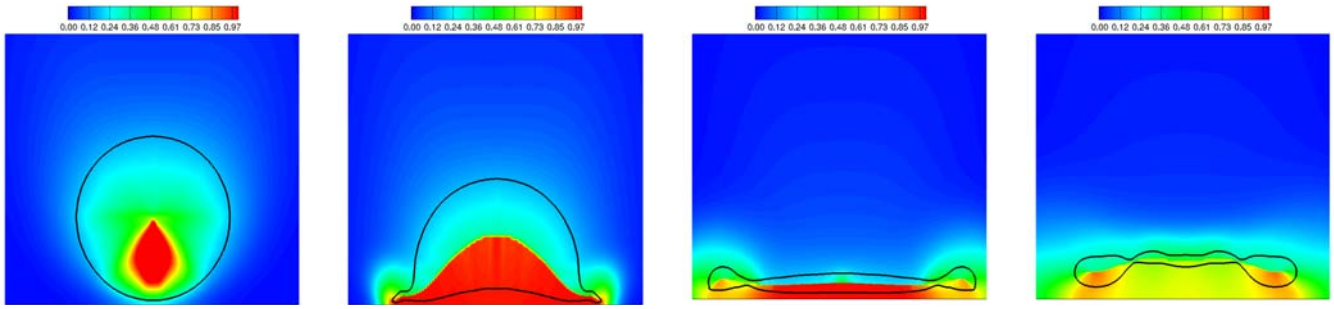



FIGURE 4.11 – Images expérimentales du rebond de trains de gouttes impactant une surface chaude à We=25.2 en régime Leidenfrost




1. 2. 3. 4.

FIGURE 4.12 – Evolution de la température d'une goutte d'eau initialement à 300K au cours d'un impact à $We = 25.2$ sur une paroi à 746K en régime Leidenfrost



1. 2. 3. 4.

FIGURE 4.13 – Evolution de la fraction massique d'une goutte d'eau initialement à 300K au cours d'un impact à $We = 25.2$ sur une paroi à 746K en régime Leidenfrost

montre que le gradient de fraction massique est plus important dans la partie inférieure de la goutte que dans la partie supérieure. En effet, comme le gradient thermique est plus important dans le film de vapeur que dans le sillage, le taux de vaporisation y est plus important et donc le gradient de fraction massique augmente. De plus, comme la vapeur est piégée (image 2) le film se sature en vapeur d'eau et la partie inférieure de la goutte est en régime d'ébullition.

Lors de l'étalement de la goutte (image 3), l'épaisseur du film de vapeur augmente dans les extrémités ce qui permet à l'air de diffuser dans le film. Ainsi, dans l'image 4, le film n'est plus totalement saturé en vapeur d'eau et l'épaisseur du film au centre a doublé par rapport à l'image précédente. De l'air a donc été diffusé et convecté par la zone de recirculation dans le film pendant que la goutte se recompactait avant de rebondir.

Le champ de vitesse au cours de l'impact est ensuite représenté dans la figure 4.14. L'image 1 montre que l'écoulement est parallèle mais le champ de vitesse est dissymétrique. Cette dissymétrie est due à la vitesse d'éjection de la vapeur à l'interface entre la goutte et l'air car il n'y a pas d'adhérence de la vapeur sur l'interface liquide/vapeur. Au contraire, une vitesse de soufflage est entretenue par le changement de phase. De plus, les vitesses atteignent $8m.s^{-1}$ entre la goutte et la paroi soit 2 fois plus que la vitesse d'impact.

Dans la deuxième image, la vaporisation de la goutte semble entrainer le liquide et favoriser l'étalement de la goutte. Les vitesse atteignent $15m.s^{-1}$ donc l'écoulement s'accélère dans le film de vapeur au cours de l'étalement. La troisième image montre le profil des vitesses pendant l'étalement maximal de la goutte. L'écoulement est à peu près parallèle, et trois zones se distinguent dans le film : entre le milieu et le creux de la goutte, l'écoulement s'accélère, il décélèle dans le creux et sa vitesse augmente à l'extrémité de la goutte.

Comme le montrent les images, la couche limite des vitesses est bien résolue grâce aux maillages très raffinés dans la zone proche de la paroi. Comme pour l'impact à $We = 7.4$ une zone de recirculation apparait lorsque la goutte se recompacte.

L'épaisseur du film de vapeur et le diamètre d'étalement de la goutte au cours du temps sont tracés dans la figure 4.15. Comme dans le cas de l'impact à $We = 7.4$, l'épaisseur du film de vapeur oscille beaucoup au cours de l'étalement et vaut en moyenne $2,8\mu m$ soit 40 fois moins que le diamètre de la goutte. La courbe montre que la goutte impacte la paroi à $t_i = 1,38 \ . \ 10^{-4}$ et décole de celle-ci à

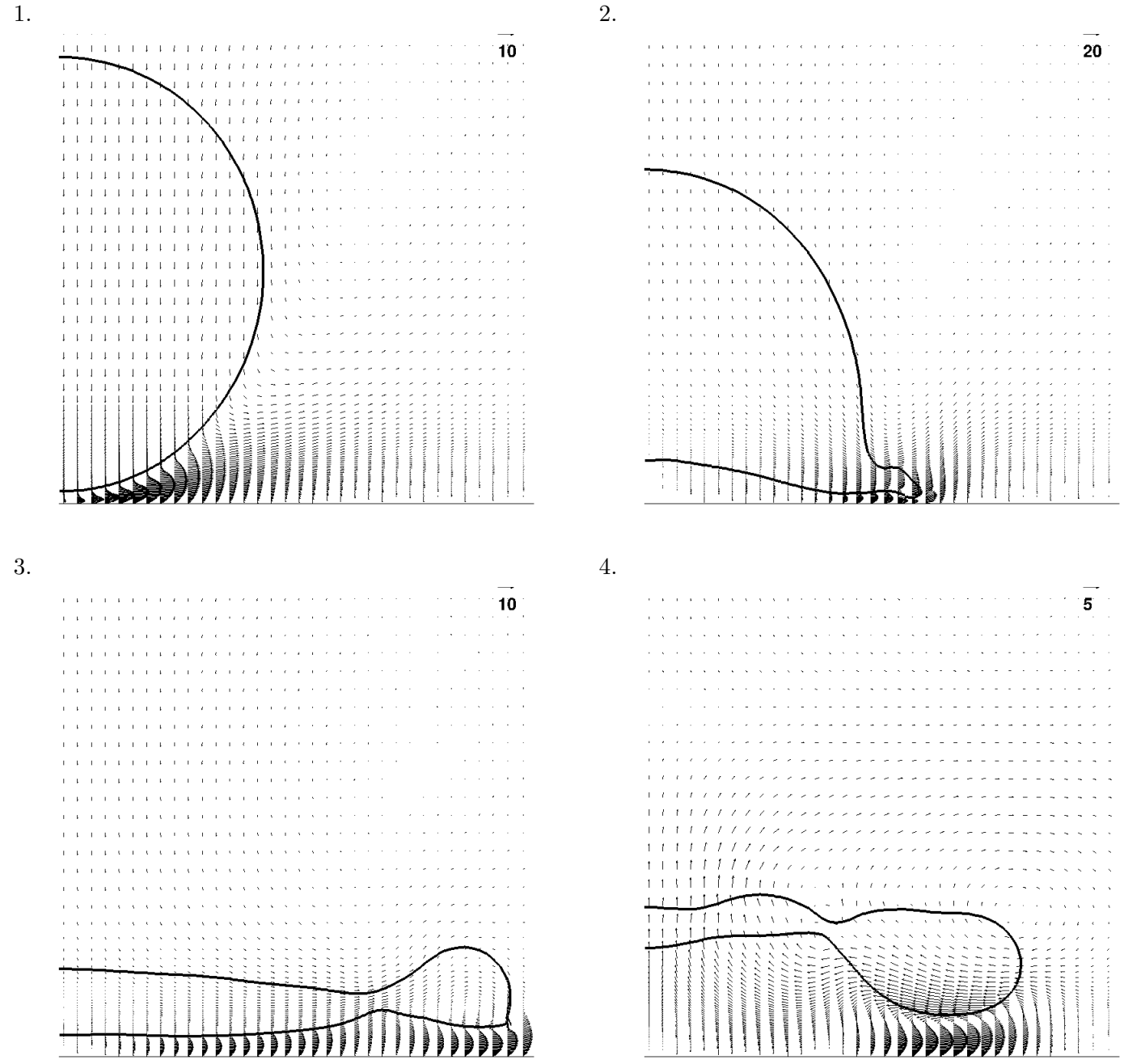
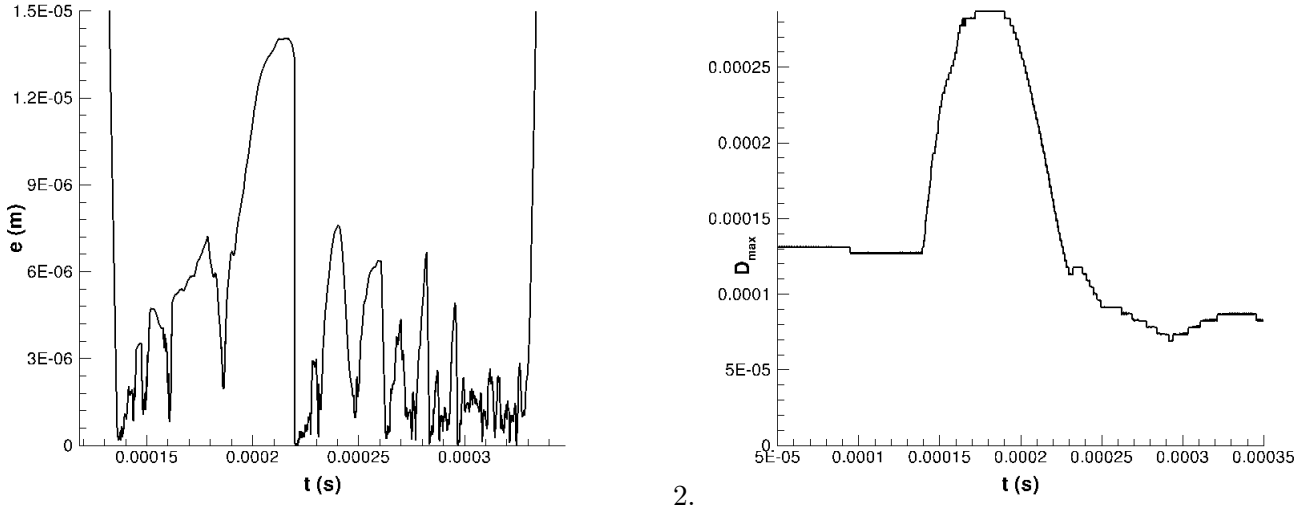



FIGURE 4.14 – Champ de Vitesse dans la couche de vapeur d'une goutte d'eau initialement à 300K au cours d'un impact à $We = 25.2$ sur une paroi à 746K en régime Leidenfrost




1. 2.

FIGURE 4.15 – Evolution au cours du temps de l'épaisseur du film de vapeur et du diamètre d'étalement (en m) d'une goutte impactant une paroi à 746K et à $We = 25.2$

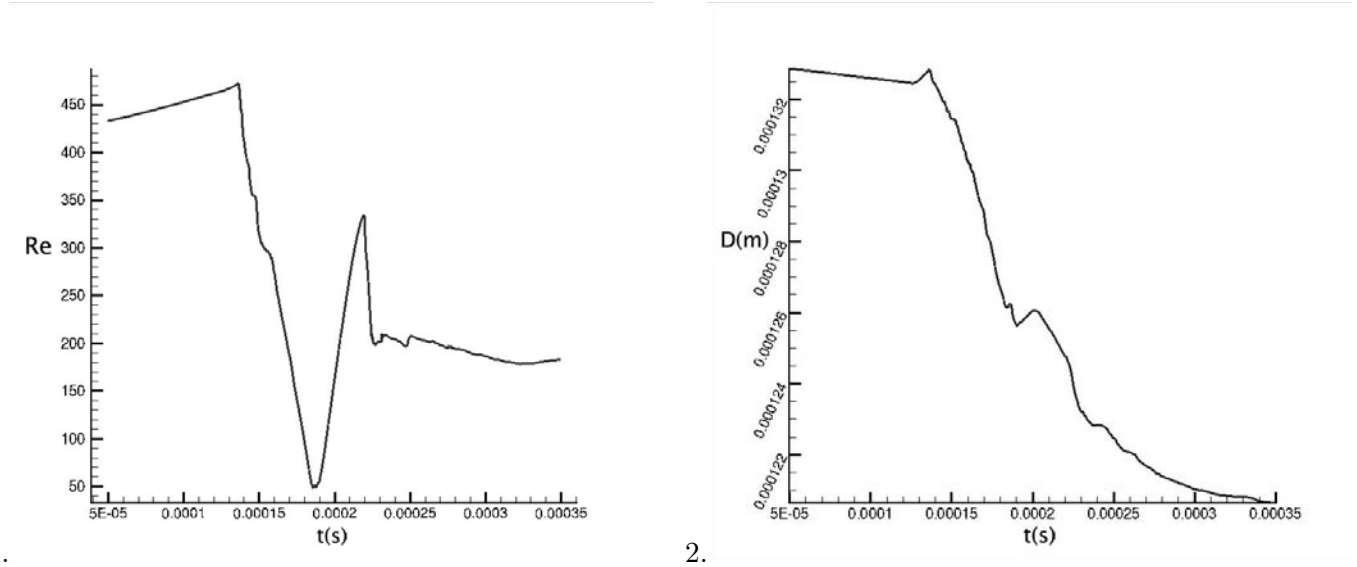
$t_d = 3,3\ .\ 10^{-4}$. Elle reste donc quelques dizièmes de milisecondes dans la zone proche de la paroi.

La courbe 4.15.2 montre que le diamètre de la goutte commence à augmenter un peu après $t_i$, ce qui semble naturel du fait que la goutte conserve la forme sphérique sur le dessus et ce n'est que le bas qui est déformé dans les premiers instants. Le diamètre d'étalement maximal de la goutte atteint $290\mu m$ soit plus de deux fois le diamètre initial, ce qui confirme que la goutte s'étale plus que pour l'impact à plus petit nombre de Weber. Le diamètre maximal est atteint au bout de quelques centièmes de milisecondes et à $t_{etal} = 1,9\ .\ 10^{-4}s$ la goutte se recompacte.

Finalement, l'évolution au cours du temps du nombre de Reynolds et du diamètre équivalent sont représentés dans la figure 4.16. Comme dans le cas de l'impact à petit Weber, le nombre de Reynolds diminue drastiquement entre $t_i$ et $t_{etal}$. Il augmente pendant que la goutte se recompacte et se décolle de la paroi avec une pente encore plus forte et se stabilise après quelques oscillations. Pour un impact à $We = 25.2$, la goutte pert 55% de sa vitesse initiale (plus que pour le cas précédent).

Comme attendu, le diamètre équivalent de la goutte diminue au cours du temps (*Cf* Fig 4.16.2). Pendant que la goutte chute, le taux de vaporisation est relativement faible et le diamètre diminue donc avec une pente faible. Pendant l'impact, peu après $t_i$, le diamètre diminue fortement pour se stabiliser ensuite lorsque la goutte décolle de la paroi. Les oscillations sont de l'ordre de la précision du calcul du volume de la goutte et ne semblent pas impliquer que la goutte se condense. La variation du diamètre est plus importante au cours de l'impact avec la paroi vaut $8,3\%$ ce qui correspond à une variation de 23% du volume de la goutte.

La simulation numérique de l'impact d'une goutte à plus fort nombre de Weber est effectuée dans la partie suivante. Les conditions de la simulation sont les mêmes que celles de l'expérience réalisée par *Dunand* où la formation d'une goutte satellite est observée après le rebond.




1. 2.

FIGURE 4.16 – Evolution au cours du temps (en $s$) du nombre de Reynolds et du diamètre équivalent (en $m$) d'une goutte d'eau impactant une surface à 746K en régime Leidenfrost

## 4.3 Impact d'une goutte à $We = 44.8$

La simulation numérique d'une goutte d'eau qui tombe sur une paroi à 814K avec un Weber d'impact de 44.8 a été étudiée dans cette partie. Le diamètre initial de la goutte est de $D_0 = 120\mu m$ et sa vitesse d'impact de $\vec{V_0} = -5,18\ \vec{e_z}\ m.s^{-1}$. La simulation est également effectuée dans un domaine où $l_x = 2\ D_0$ et $l_z = 3\ l_x$ dans un maillage à $96 \times 384$ mailles, avec une fois encore, une concentration de mailles plus grande dans la zone proche de la paroi.

Comme pour les cas précédents, la figure 4.17 permet de comparer les résultats expérimentaux de *Dunand* de l'impact d'un train de gouttes sur une paroi à 814K, la visualisation 3D de la simulation numérique effectuée avec $\mathcal{DIVA}$ et le champ de température calculé. Les images (a), (b) et (c) montrent que la goutte conserve une forme sphérique avant l'impact avec la paroi. Dans les images (d), la goutte est dans l'état d'étalement maximal et une couronne relié par une fine nappe liquide se forme comparable à celle de l'impact à $We = 25.2$. Dans les simuations numériques la goutte conserve sa symétrie axiale puisque le modèle l'impose (image 2e et 3e) mais dans l'expérience, la goutte se destabilise et cette symétrie est rompue dans l'image 1e. Cette dissymétrie est peut être due à la vitesse tangentielle ou à la rugosité de la paroi. Dans l'image 1f, la goutte retrouve une symétrie axiale et une forme de quille tout à fait comparable aux simulations des images 2f et 3f bien que moins élancée.

Une goutte satellite se forme dans les images 1g 2g et 3g. L'expérience montre que la goutte principale a une forme de bonhomme de neige, et la sphère inférieure est plus volumineuse que la supérieure, ce qui est parfaitement reproduit par la simulation. Dans les images 1h, 2h et 3h la goutte satellite s'éloigne de la paroi plus rapidement que la goutte principale.

Les images montrent donc une bonne concordance entre la simulation numérique et les résultats expérimentaux puisqu'ils détaillent bien la formation d'une goutte satellite après l'impact similaire à celle de l'expérience.

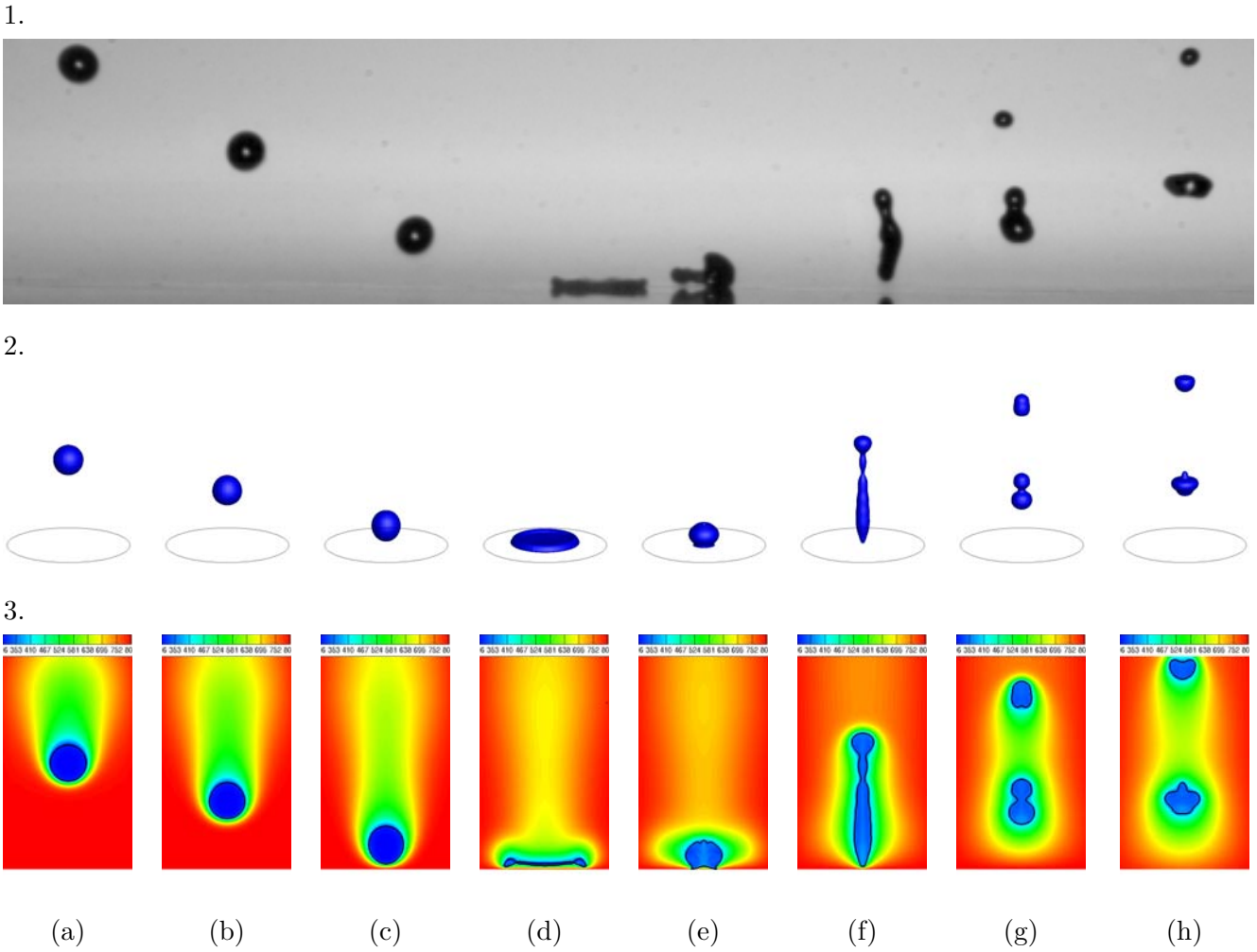
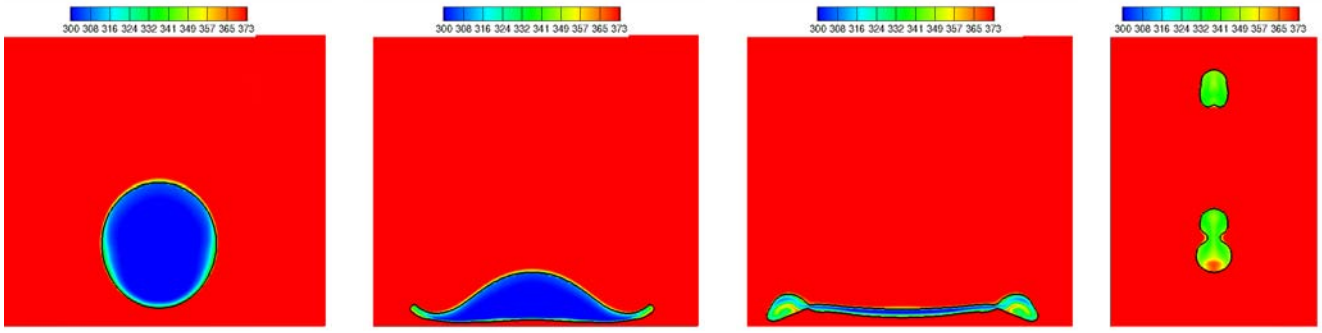



FIGURE 4.17 – Images expérimentales, visualisation 3D et profil de température d'une simulation 2D axi-symétrique du rebond d'une goutte impactant une surface chaude à We=44.8 en régime Leidenfrost




1. 2. 3. 4.

FIGURE 4.18 – Température d'une goutte d'eau au cours d'un impact sur une paroi à 814K en régime Leidenfrost

La température de la goutte à 4 instants de l'impact est représentée dans la figure 4.18. Comme dans les impacts à plus petits nombre de Weber, les isocontours de température dans la première image sont légèrement décalés du fait de la chute de la goutte. De plus, la température de l'interface inférieure de la goutte est plus importante que celle de la partie supérieure. Enfin, la goutte semble s'allonger avant l'impact comme si elle était aspirée par la paroi. Ce phénomène était déja visible dans l'impact à $We = 25.2$ mais l'allongement était moindre. Les isocontours de température suivent la forme de la goutte dans l'image 2 pendant l'étalement.

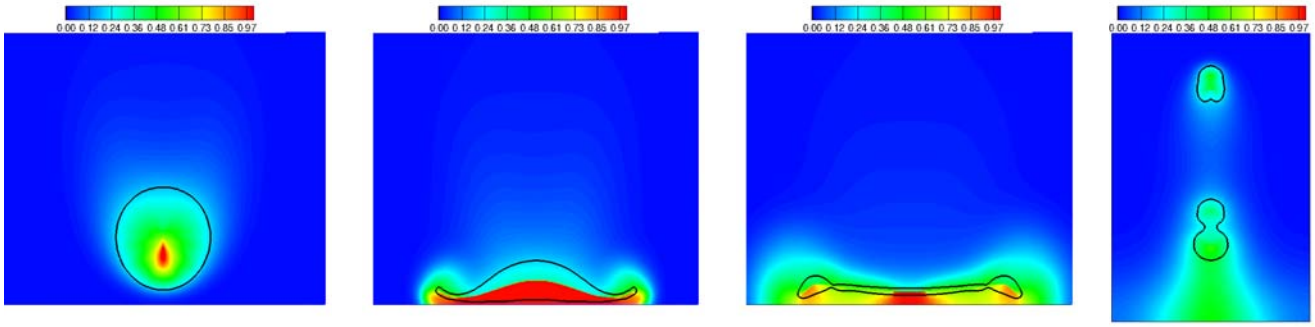
Les structures de température liées aux écoulements internes dans la goutte sont également visibles dans l'image 3 : la couronne de liquide est donc plus chaude en son centre que près des bords et la nappe d'eau moins chaude que le centre de la couronne qu'elle relie. Finalement, lorsque la goutte satellite s'éloigne de la paroi elle est plus chaude en son centre qu'autour (image 4) et la partie inférieure de la goutte principale est encore à la température d'ébullition.

La figure 4.12 montre également une différence de température de presque 50K entre la première et la dernière image. De plus, au sein même de la goutte, la température peut varier de façon importante : dans la dernière image par exemple, elle va de 324K à 370K.

La figure 4.19 montre l'évolution de la fraction massique au cours de l'impact d'une goutte avec la paroi. Comme dans les deux cas précédents, une couche de vapeur se forme sous la goutte et la maintient en lévitation au dessus de la paroi.

Les différentes étapes décrites dans les deux cas précédents sont également visibles dans cette figure : juste avant l'impact, le gradient de fraction massique est plus important dans la partie inférieure que dans la partie supérieure de la goutte (image 1) puis le film de vapeur est saturé pendant l'étalement (image 2). Lorsque l'étalement est maximal, l'épaisseur de film augmente ce qui permet à l'air de diffuser dans le film (image 3) et finalement, lorsque la goutte s'éloigne de la paroi, la vapeur se mélange dans l'air (image 4).

La figure 4.20 montre le champ de vitesses dans la goutte avant l'impact (image 1), pendant la phase d'étalement (image 2) et lorsque l'étalement est maximal et que la goutte se recompacte (image 3). Avant l'impact l'écoulement est laminaire ce qui permet d'observer un profil de vitesses bien établi dans le film de vapeur. Dans la deuxième image, l'écoulement est toujours parallèle dans le film de vapeur et la vitesse



1. 2. 3. 4.

FIGURE 4.19 – Evolution de la fraction massique au cours de l'impact d'une goutte d'eau sur une paroi à 814K en régime Leidenfrost

augmente du centre de la goutte vers les extrémités. Dans cette étape, l'écoulement du gaz peut atteindre $30m.s^{-1}$ soit près de 5 fois plus que la vitesse d'impact.

Cette phase d'accélération dans le film de vapeur est due à la conservation du débit évaporé et du débit de sortie du film. En effet, le débit de la masse évaporée vaut $q_{evap} = \bar{\dot{\omega}}\pi x^2$ où $\bar{\dot{\omega}}$ est le taux de masse évaporé moyen. Le débit de sortie vaut $q_{sortie} = \rho_g \bar{V}_d 2\pi x\delta$ où $\bar{V}_d$ est la vitesse débitante moyenne dans le film et $\delta$ l'épaisseur du film. L'égalité entre ces deux débits permet d'établir la relation suivante :

$$\bar{V}_d = \frac{\bar{\dot{\omega}} x}{2\rho_g \delta} \tag{4.1}$$

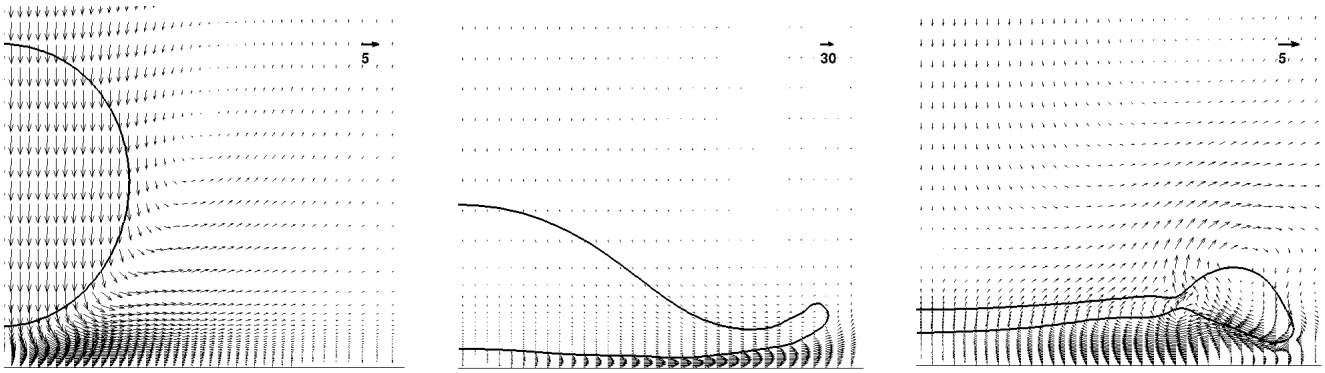
Ce qui permet d'expliquer l'augmentation de la vitesse débitante lorsque $x$ augmente.

Finalement, dans la troisième image, une zone de recirculation à l'extrémité du film de vapeur est observée ainsi que dans la partie supérieure de l'extrémité. La figure 4.20 montre également qu'une zone de recirculation apparaît lorsque la goutte se recompacte. Cette zone de recirculation a certainement un effet important sur la composition du mélange gazeux dans le film (film partiellement saturé).

L'épaisseur du film de vapeur et l'étalement de la goutte à chaque pas de temps de simulation sont tracés dans la figure 4.21. L'épaisseur du film de vapeur évolue de façon analogue à celle des autres impacts étudiés. Sa valeur moyenne vaut $2,8$ microns soit 43 fois plus que le diamètre initial et la courbe permet de définir $t_i = 1,0510^{-4}$ et $t_d = 2,6210^{-4}$ soit les instants où la goutte impacte la paroi et où elle décolle.

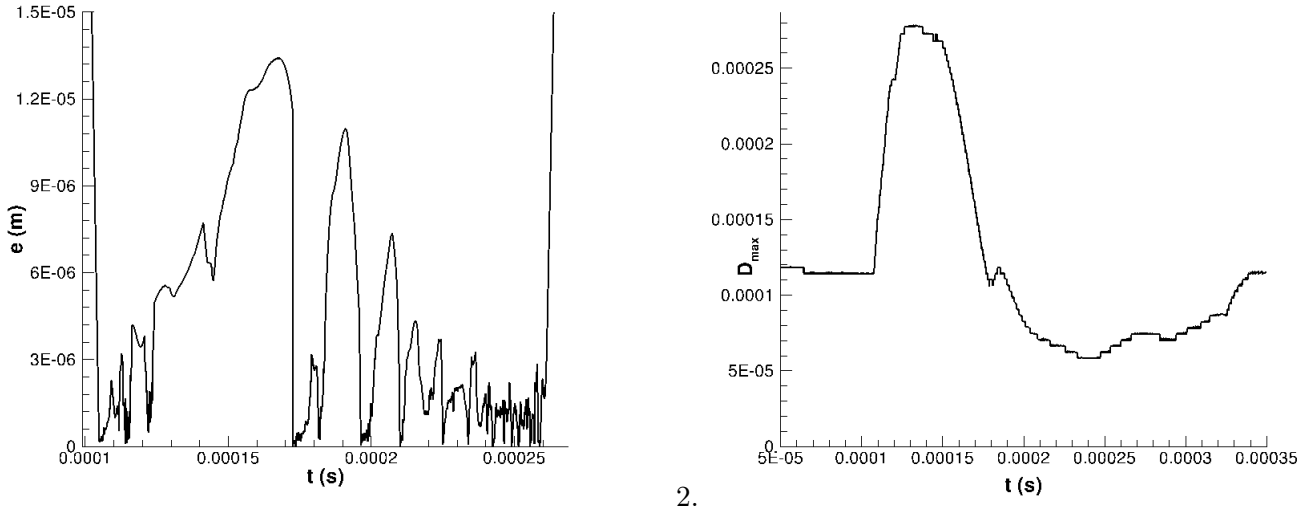
La courbe 4.21.2 montre que le diamètre d'étalement est constant avant $t_i$ puis il augmente jusqu'à atteindre $280\mu m$ soit 2,3 fois plus que son diamètre initial. À partir de $t_{etal} = 1,410^{-4}$, la goutte se recompacte aussi rapidement qu'elle s'est étalée puis s'allonge ce qui fait diminuer le diamètre d'étalement avant de converger vers une valeur qui sera bien plus faible que le diamètre initial en raison de la formation de la goutte satellite.

L'évolution au cours du temps du nombre de Reynolds et du diamètre equivalent est tracé dans la figure 4.22. La courbe 4.22.1 que le nombre de Reynolds diminue fortement de $t_i$ à $t_{etal}$ avant d'augmenter lorsque la goutte se détache de la paroi pour converger vers une valeur plus faible que $Re(t = 0)$ : la goutte perd en effet 60% du produit de sa vitesse et de son diamètre equivalent.




1. 2. 3.

FIGURE 4.20 – Champ de vitesse au cours de l'impact d'une goutte d'eau sur une paroi à 814K en régime Leidenfrost




1. 2.

FIGURE 4.21 – Evolution au cours du temps de l'épaisseur du film de vapeur et du diamètre d'étalement (en m) d'une goutte impactant une paroi à 814K et à $We = 44.8$

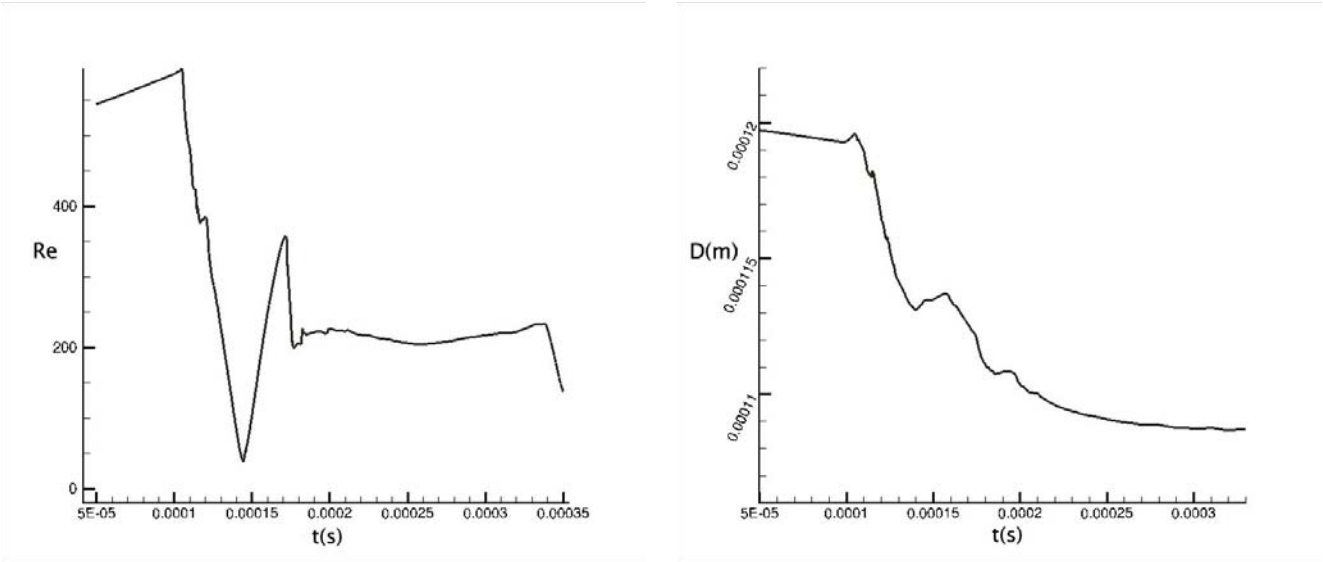



FIGURE 4.22 – Evolution au cours du temps (en $s$) du nombre de Reynolds et du diamètre équivalent (en $m$) d'une goutte d'eau impactant une surface à 746K en régime Leidenfrost

L'allure de la courbe 4.22.2 est la même que dans les deux autres cas d'impact. Elle montre que la goutte pert $9,2\%$ de son diamètre soit $25\%$ de son volume, ce qui est plus important que pour les deux autres impacts. La perte de volume semble donc corrélée au nombre de Weber normal de l'impact.

Les résultats des simulations des trois impacts sont confrontés entre eux et comparés aux résultats expérimentaux dans la partie suivante afin d'évaluer la validité de l'algorithme utilisé.

## 4.4 Comparaison des résultats

L'objectif de cette partie est d'étudier les échanges thermiques entre la goutte, l'air et la paroi ainsi que de comparer les résultats des simulations avec les expériences sur les trains de gouttes réalisées par *Dunand 2012* [20] dans le but de valider le modèle développé au cours de cette étude.

### Température moyenne dans le liquide

Un des principaux intérêts de la simulation numérique directe est l'évaluation précise des variables d'état du système qui permettent de caractériser les échanges thermiques. La connaissance du champ de température permet par exemple de calculer, grâce à la méthode de *Min et Gibou* [66] détaillée dans la partie 3.3.3, la température moyenne $\bar{T}$ à chaque pas de temps :

$$\bar{T} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\Omega^+} T \, d\Omega \tag{4.2}$$

Où $\mathcal{V}$ est le volume de la goutte.

L'évolution au cours du temps de la température moyenne de la goutte est tracée dans la figure 4.23 pour deux nombres de Weber : $We = 7.4$ et $We = 44.8$. Pour le cas de l'interaction goutte/paroi à

$We = 7.4$, la température initiale de la goutte avant l'impact est de 308K et pour le cas à $We = 44.8$, elle vaut 288K. Le gaz est initialement à la température de la paroi soit 800K pour l'impact à petit nombre de Weber et 746K pour l'autre.

Les deux courbes évoluent de manière analogue : avant l'impact, la température augmente faiblement mais de façon constante puis, pendant que la goutte s'étale et se recompacte dans la zone proche de la paroi, une très forte augmentation est observée avant d'atteindre une température moyenne constante pour l'impact à $We = 44.8$ et une augmentation avec une pente plus faible pour l'impact à $We = 7.4$.

La courbe montre que plus le nombre de Weber est important, plus l'augmentation de la température est forte. En effet, pour l'impact à petit nombre de Weber $We = 7.4$, l'augmentation est de 18K alors qu'elle vaut plus du double pour l'impact à $We = 44.8$. Ces observations permettent de déduire que la chaleur est transmise à la goutte principalement lorsqu'elle s'étale et se recompacte dans la zone proche de la paroi.

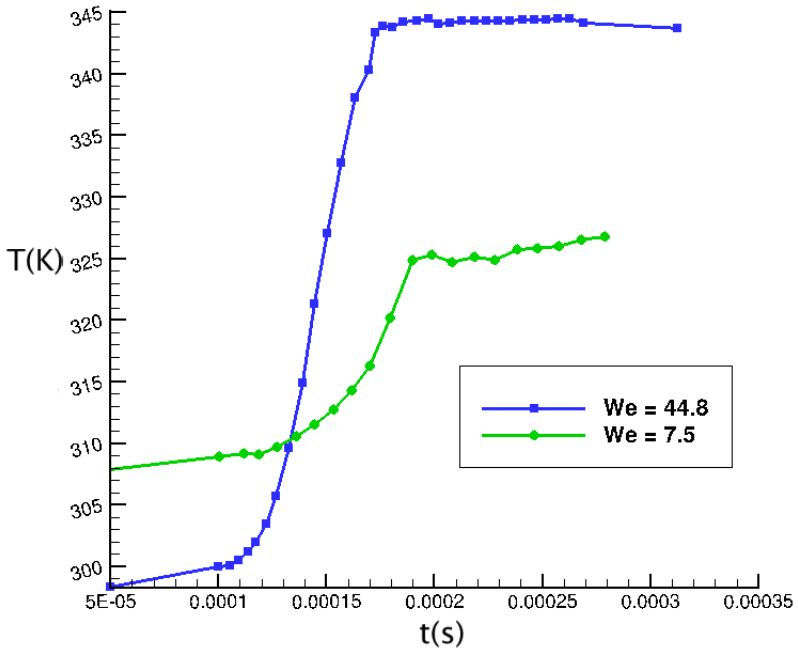



FIGURE 4.23 – Evolution au cours du temps de la température moyenne de la goutte pour les impacts à $We = 7.4$ et $We = 44.8$

### Evolution du flux thermique

Pour confirmer cette observation, l'évolution au cours du temps du flux de chaleur total donnée à la goutte $\Phi$ est tracé dans la figure 4.24. La quantité $\Phi$ est mesurée en watts et s'écrit :

$$\Phi = \int_{\partial\Omega} -\kappa \nabla T . \vec{n} dS \tag{4.3}$$

Où $\kappa$ désigne la conductivité thermique de la phase vapeur, $\vec{n}$ la normale extérieure au gaz à l'interface et le gradient de température est évalué dans la phase vapeur. Cette intégrale de surface est également calculée à l'aide de la méthode présentée dans la partie 3.3.3.

Dans les courbes de la figure 4.24 le flux thermique avant l'impact est constant puis il augmente très fortement pendant l'étalement de la goutte pour arriver à un pic maximal dans le cas de l'impact à $We = 44.8$ et à deux pics pour l'impact à $We = 7.4$. Le flux thermique va ensuite diminuer rapidement pour atteindre un état quasi-constant.

Comme attendu, la figure montre que les transferts thermiques sont plus important lorsque la goutte est proche de la paroi, car c'est dans la zone où se forme la couche de vapeur que le gradient thermique est le plus important.

Dans le cas de l'impact à $We = 44.8$, le pic de flux thermique est atteint à l'instant $t_{44} = 1,22.10^{-4}s$ et vaut $0,29$ W. Comme le diamètre d'étalement est maximal à $t = 1,26.10^{-4}s$ (*Cf* Fig. 4.21), soit au moment même où le pic se produit, tout porte à croire que les deux phénomènes sont corrélés. En effet, c'est au moment où l'étalement est maximal que la surface de liquide faisant fâce à la paroi est la plus grande : c'est donc le moment où la paroi fournit le plus de chaleur à la goutte.

L'évolution du flux pour l'impact à $We = 7.4$ confirment la corrélation des deux phénomènes puisque les pics principaux de flux thermique apparaissent à $t_7 = 1,37.10^{-4}s$ et $t_7 = 1,64.10^{-4}s$ et que le diamètre d'étallement maximal de l'impact à $We = 7.4$ se produit à $t = 1,45.10^{-4}s$ et $t = 1,71.10^{-4}s$ (*Cf* Fig. 4.7).

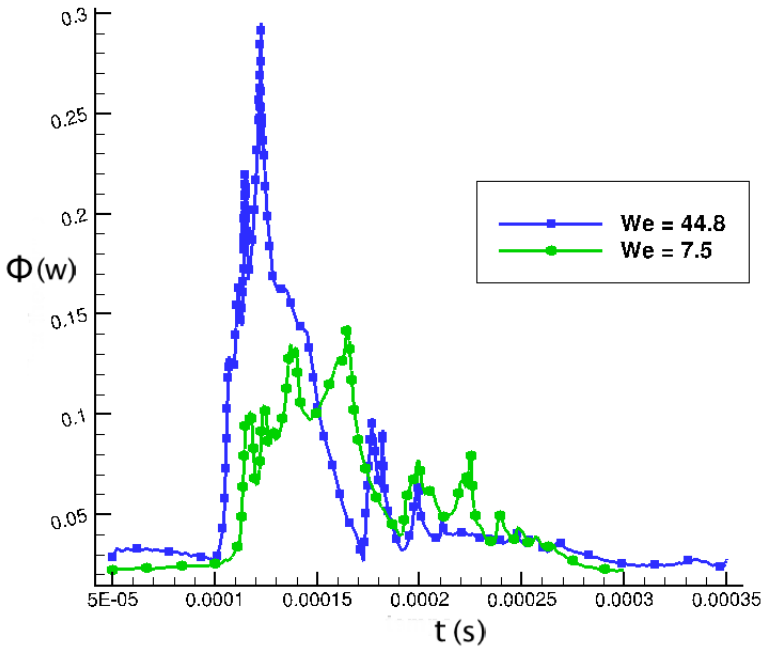



FIGURE 4.24 – Evolution au cours du temps du flux de chaleur entre la goutte et le gaz pour les impacts à $We = 7.4$ et $We = 44.8$

### Diamètre d'étalement maximal

Les résultats des simulations numériques sont à présent comparés aux résultats expérimentaux effectués dans [20]. *Dunand* a réalisé des expériences sur des trains de gouttes d'eau, d'ethanol et d'un mélange d'eau et glycérol à plusieures concentrations différentes pour caractériser les régimes d'impact entre une goutte et une paroi. Il s'est principalement intéressé aux régimes de rebond et de splashing en fonction des nombres de Weber et Walzel ($We$ et $K$).

Il a ensuite étudié la dynamique de l'impact en mesurant notamment le temps de séjour de la goutte dans la zone proche de la paroi, son étalement maximal et la différences de vitesse moyenne de la goutte avant et après l'impact. Ces résultats seront comparés aux trois simulations numériques présentées précedemment dans ce chapitre.

Dans la figure 4.25 sont tracés le diamètre d'étalement maximal adimensionné $\beta_{max}$ (4.4) en fonction du nombre de Weber normal lors de l'impact. La courbe comprend les résultats expérimentaux de *Dunand* pour les trains de gouttes d'eau à différents $We$, les courbes de *Hatta* et *Karl et Frohn* et les simulations numériques de la présente étude.

$$\beta_{max} = \frac{D_{max}}{D_0} \tag{4.4}$$

Sans surprise, la courbe est monotone : le diamètre d'étalement $\beta_{max}$ augmente quand le nombre de Weber de l'impact augmente. Cependant, les résultats montrent que la pente de la courbe est plus importante pour des petit nombres de Weber ($\sim We = 30$) et elle s'atténue ensuite.

Les résultats s'accordent sur une même tendance et sont très proches les uns des autres. La courbe de *Hatta et al.* [46] marque la limite supérieure des résultats de *Dunand* tandis que la courbe de *Karl et Frohn* est parfaitement dans la tendance des résultats expérimentaux. Les corrélations de *Hatta et al.* et de *Karl et Frohn* avec leurs domaines de validité s'écrivent respectivement :

$$\beta_{max} = 0,093\ We_n^{0,74} + 1 \quad \text{Pour } 0 \leqslant We_n \leqslant 35 \tag{4.5}$$

$$\beta_{max}^3 - \left[\frac{We_n}{6}\left(\frac{1+r_n^2}{2}\right) + 2\right]\beta_{max} + \frac{4}{3} = 0 \quad \text{Pour } 0 \leqslant We_n \leqslant 55 \tag{4.6}$$

Où $r_n$ désigne le coefficient de restitution associé à la composante des vitesses normale à la paroi. $r_n$ est le rapport entre la vitesse normale incidente et la vitesse normale après l'impact. *Karl et Frohn* ont également effectué une corrélation sur cette valeur et l'ont utilisé pour calculer $\beta_{max}$ :

$$r_n = 1 - 0,263\ We_n^{0,257} \quad \text{Pour} \quad 0 \leqslant We_n \leqslant 25. \tag{4.7}$$

### Surface maximale de la goutte

Lors de l'impact, une grande partie de l'énergie cinétique est transformée en énergie potentielle de surface ce qui conduit à l'étalement de la goutte sur la paroi et aux mouvement internes dans le liquide. Le reste de l'énergie est dissipée du fait de la viscosité du fluide. En effet, la loi de conservation de l'énergie totale s'écrit :

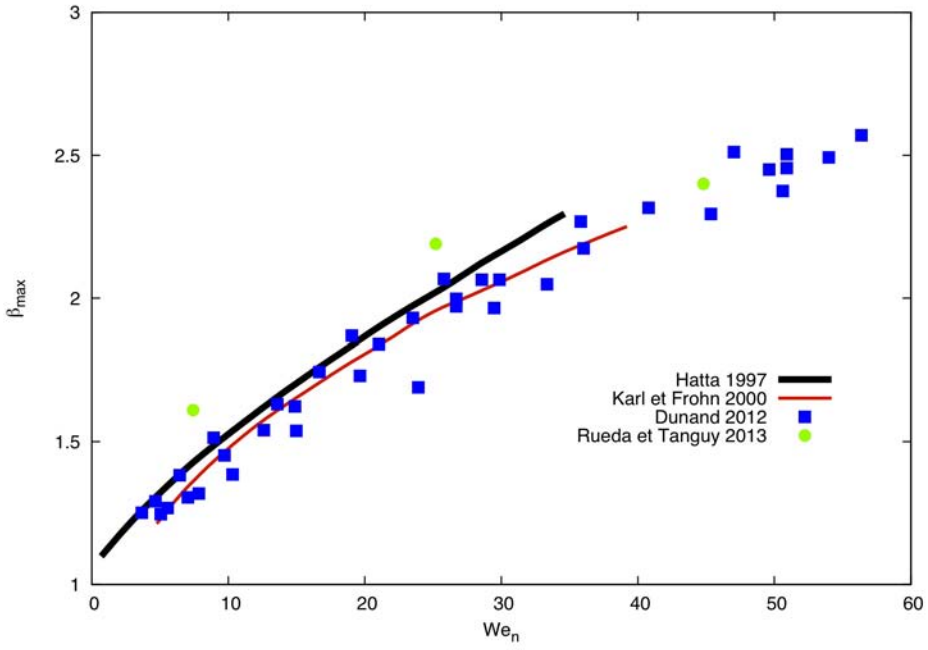



FIGURE 4.25 – Diamètre d'étalement adimensionné en fonction du nombre de *Weber* normal d'impact : résultats expérimentaux de *Dunand* (▪), courbes de *Hatta* et de *Karl et Frohn* et simulations numériques de *Rueda-Villegas et Tanguy* (•)

$$\frac{d}{dt}E + \Pi_d = 0 \tag{4.8}$$

Où $E$ est l'énergie mécanique et $\Pi_d$ la puissance d'énergie dissipée sous forme de frottements. L'énergie mécanique est la somme de l'énergie cinétique de la goutte (dûe à la translation du centre de masse de la goutte), de l'énergie cinétique interne et de l'énergie potentielle de surface. L'énergie cinétique interne dûe aux écoulements internes est négligée de sorte que :

$$E = \frac{1}{2}\, m\, \bar{V}^2 + \sigma A \tag{4.9}$$

Où $\bar{V}$ est la vitesse moyenne de la goutte, $m$ sa masse et $A$ sa surface. Donc, d'après l'équation (4.8), pour une goutte initialement sphérique :

$$\frac{\pi}{12}\, \rho_l D_0^3\, \bar{V}_0^2 + \sigma A_0 = \sigma A_{max} + \Pi_{et_{max}} \tag{4.10}$$

$$\Rightarrow\ \frac{We}{12} + 1 = \frac{A_{max}}{A_0} + \mathcal{D}_{et_{max}} \tag{4.11}$$

Avec $\mathcal{D}_{et_{max}}$ le rapport entre l'énergie dissipée à l'étalement maximal et $\sigma A_0$. *Karl et Frohn* ont estimé cette valeur, qui dépend du coefficient de restitution 4.7 :

$$\mathcal{D}_{et_{max}} = \frac{We}{12}\ \left(\frac{1 - r_n^2}{2}\right) \tag{4.12}$$

La figure 4.26 montre l'évolution du rapport $A_{max}/A_0$ en fonction du nombre de Weber pour les cas expérimentaux de *Dunand* et les simulations numériques de la présente étude ainsi que la courbe théorique dans le cas où il n'y a pas d'énergie dissipée. *Dunand* a estimé la surface maximale en considérant la forme de la goutte comme une sphéroïde :

$$\frac{A_{max}}{A_0} = \frac{1}{2}\beta_{max}^2 + \frac{1}{4\varepsilon\beta_{max}^4}\ln\left(\frac{1_\varepsilon}{1-\varepsilon}\right) \qquad \text{où} \qquad \varepsilon = \sqrt{1 - \beta_{max}^{-6}} \tag{4.13}$$

Comme attendu, les résultats expérimentaux montrent que le rapport $A_{max}/A_0$ évolue de manière linéaire en fonction du nombre de Weber. La pente de la courbe est cependant plus faible que dans le cas sans dissipation. En effet, en introduisant $\xi$ la fraction de l'énergie cinétique dissipée, le rapport $A_{max}/A_0$ s'écrit :

$$\frac{A_{max}}{A_0} = 1 + (1-\xi)\frac{We}{12} \qquad \text{et} \qquad \mathcal{D}_{et_{max}} = \xi\frac{We}{12} \tag{4.14}$$

*Dunand* montre que près de 40% de l'énergie cinétique initiale est dissipée pendant la phase d'étalement. En réalisant une étude d'impact de trains de gouttes avec des liquides différents (eau, ethanol, glycerol + eau à $30\% + 70\%, 50\% + 50\%$ et $65\% + 35\%$) *Dunand* a montré que la dissipation dépend de la viscosité du fluide : plus le fluide est visqueux, plus la dissipation est importante.

Les résultats des simulations sont en accord avec les résultats expérimentaux et ils se situent dans la limite supérieure des points de mesure. Le calcul de la surface maximale d'étalement est sous-estimé dans le cas des mesures car la goutte est assimilée à une ellipsoïde. Dans le cas des simulations, le calcul est effectué avec un algorithme géomètrique d'ordre 2 de calcul de volumes et surfaces présenté dans la partie 3.3.3. La figure 4.26 montre que la surface sous estimée n'est pas si négligeable mais que l'approximation

effectuée est correcte dans la gamme des nombres de Weber étudiée.

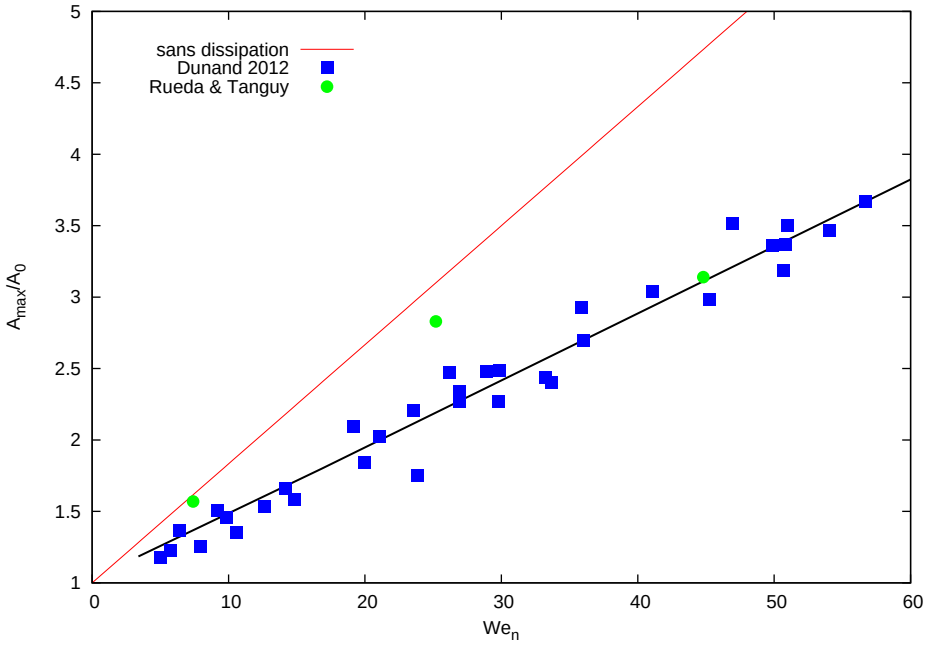



FIGURE 4.26 – Surface maximale adimensionnée en fonction du nombre de *Weber* normal d'impact : résultats expérimentaux de *Dunand* (▪) et simulations numériques de la présente étude (•)

## Coefficient de restitution

Le coefficient de restitution $r_n$ en fonction du nombre de weber est à présent étudié. Ce paramètre caractérise la perte de la quantité de mouvement observée par *Anders et al.* [1] et *Karl et Frohn* [56] :

$$L = \frac{m\bar{V}_{av} - m\bar{V}_{ap}}{m\bar{V}_a v} = 1 - \frac{m\bar{V}_{ap}}{m\bar{V}_{av}} \tag{4.15}$$

$$L = 1 - r_n \tag{4.16}$$

Où $\bar{V}_{av}$ est la vitesse moyenne avant l'impact et $\bar{V}_{ap}$ la vitesse moyenne après l'impact. L'équation 4.16 n'est valable que si la perte de masse durant l'impact est négligeable par rapport à la différence des vitesses.

*Karl et Frohn* ont réalisé une corrélation de ce paramètre dans l'équation (4.7) qui est tracée dans la figure 4.27. Sont également tracés les mesures expérimentales réalisées par *Dunand* et les simulations numériques.

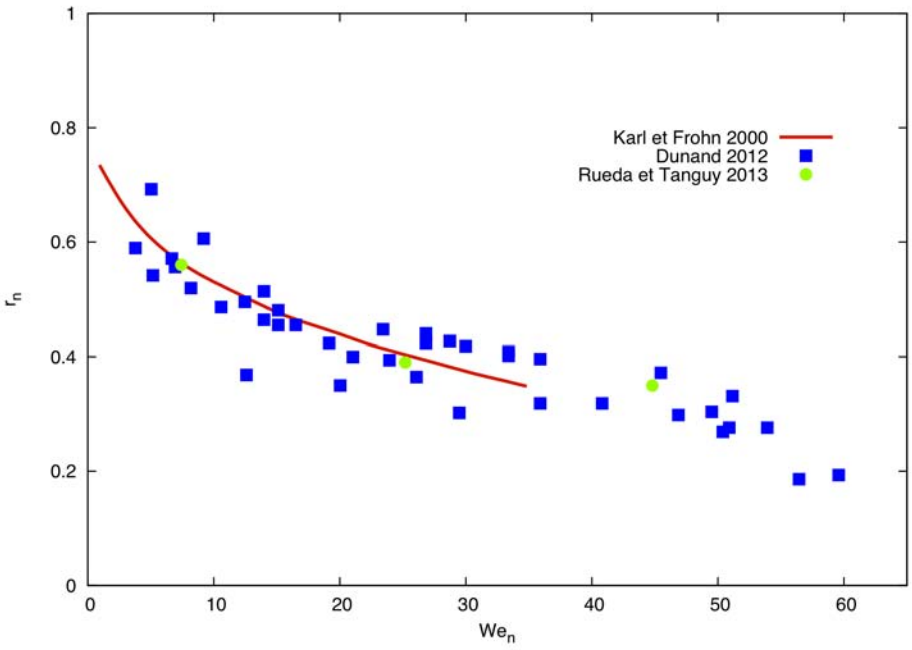



FIGURE 4.27 – Coefficient de restitution $r_n$ en fonction du nombre de *Weber* normal d'impact : résultats expérimentaux de *Dunand* (▪), courbe de *Karl et Frohn* et simulations numériques de la présente étude (•)

La figure montre que le coefficient de restitution décroit en fonction du nombre de Weber. Les résultats expérimentaux, la corrélation de *Karl et Frohn* et les résultats de nos simulations numériques sont en parfait accord.

Les trois études précédentes ont montré que les simulations numériques reproduisent fidèlement la dynamique de l'impact d'une goutte d'eau sur une paroi chaude. Dans la partie suivante sont confrontés les résultats expérimentaux et numériques du point de vue de la thermodynamique.

### Echauffement de la goutte

Une étude thermodynamique complète sur la goutte et sur la paroi a également été effectuée par *Dunand*. La figure 4.28 est tirée des résultats exposés dans [20] et montre la différence de température moyenne dans le liquide avant et après l'impact en fonction de la température de la paroi, pour différents nombres de Weber.

La figure 4.28 montre que la différence de température avant et après l'impact est indépendante de la température de la paroi. En effet, les gouttes lévitent sur un film de vapeur sans être en contact direct avec la paroi, ce qui diminue son influence. Pourtant, le flux thermique capturé par la goutte dépend du gradient de température qui peut changer si la température de la paroi varie.

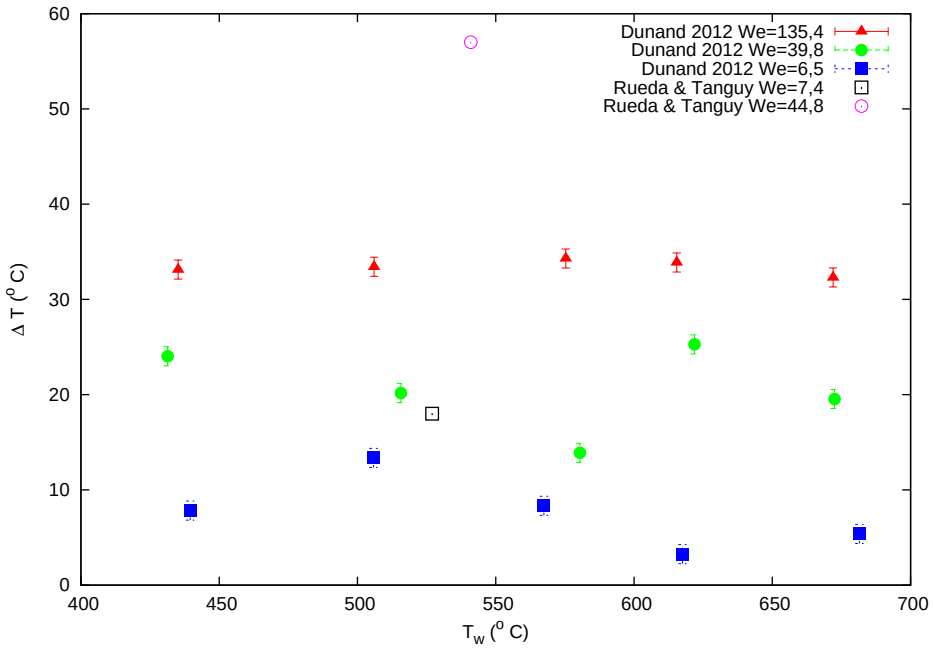



FIGURE 4.28 – Différence de température de la goutte avant et après l'impact en fonction de la température de la surface : résultats expérimentaux de *Dunand* et simulations numériques de *Rueda-Villegas et Tanguy*

Cet effet est peut être compensé par l'augmentation de l'épaisseur du film de vapeur ce qui rend le gradient constant. La différence de température semble dépendre du nombre de Weber puisqu'elle augmente avec le nombre de Weber d'impact. Les résultats des simulations numériques pour l'impact à $We = 7.4$ et l'impact à $We = 44.8$ sont également tracés dans la figure 4.28. Si les simulations confirment que la différence de température augmente quand le nombre de Weber augmente, elles surestiment fortement la surchauffe de la goutte.

Dans le cas du nombre de Weber $We = 7.4$ les résultats suivent la tendance mais dans le cas de l'impact à $We = 44.8$, la différence de température calculée numériquement est le double de la valeur expérimentale. L'incertitude des données expérimentales ne peut expliquer à elle seule une telle différence.

Dans les simulations numériques, nous avons supposé que la goutte était immergée dans un environnement gazeux uniformément chauffé à la température de la paroi. Cette condition initiale n'est vraisemblablement pas représentative de la réalité puisqu'un gradient thermique lié à la couche limite de convection naturelle doit s'établir lorsque l'on s'éloigne de la plaque. Ainsi la condition initiale et les conditions limites imposées peuvent avoir une contribution non nulle sur le supplément d'échauffement observé dans les simulations par rapport aux expériences. Notons cependant que les courbes et les images extraites des simulations permettent d'établir sans ambiguïté que la plus grande partie de l'échauffement observé se fait pendant l'impact et dans la zone du film de vapeur. Cette différence entre les conditions expérimentales et les simulations ne devrait donc avoir qu'un impact limité sur les résultats des simulations.

Si dans les simulations l'épaisseur de film est sous-estimé par rapport aux expériences (ce qui ne peut

être confirmé puisqu'il n'a pas été mesuré) le gradient thermique peut être sur-estimé et contribuer à augmenter l'échauffement. En effet, les simulations numériques considèrent l'impact d'une goutte avec un angle d'incidence $\alpha_{DNS}$ perpendiculaire à la paroi. Dans les expériences le train de goutte impacte la paroi avec un angle $\alpha < \alpha_{DNS}$ or d'après *Yao et Cai* et *Karl et Frohn*, pour des petits angles l'entrainement d'air dans la couche de vapeur sous la goutte favorise le régime de Leidenfrost pour des plus petites températures et contribue donc à l'augmentation de l'épaisseur du film.

De plus, un mouvement tangentiel de la goutte par rapport à la paroi pendant l'impact peut modifier de façon significative la composition en fraction massique du film de vapeur. En effet, on peut facilement imaginer que le film de vapeur d'eau ne restera pas parfaitement saturé si des entrées d'air dues au mouvement tangentiel se produisent dans le film pendant l'impact. A partir de là, on comprendra aisément que si le film n'est pas parfaitement saturé, la condition d'équilibre thermodynamique à l'interface sera modifiée et la température à l'interface va diminuer. Ce phénomène pourrait conduire naturellement à une diminution du gradient thermique contribuant à l'échauffement de la goutte.

Le modèle physique n'est pas complet puisque l'écoulement est supposé incompressible et que les variables telles que la viscosité ou la masse volumique ne dépendent pas de la température. Pourtant, étant donné les différences de température entre la goutte et la paroi dans la couche de vapeur (qui ne mesure que quelques microns) ces variables peuvent fortement changer et avoir une influence sur l'échauffement de la goutte et sur l'épaisseur du film de vapeur.

Notons en particulier que les valeurs de masse volumique dans la phase vapeur ne sont pas représentatives des valeurs du mélange air-vapeur d'eau à haute température. En effet, nos simulations ont été effectuées avec une valeur de masse volumique de $1.2kg.m^{-3}$, alors qu'en utilisant la loi des gaz parfaits pour calculer la masse volumique d'un mélange de gaz on trouverait des valeurs de masse volumique qui varient entre $0.3kg.m^{-3}$ et $0.9kg.m^{-3}$ selon la température et la composition chimique locale considérée. Dans le cadre de simulations supposant une phase gazeuse parfaitement incompressible, une valeur moyenne de $0.6kg.m^{-3}$ aurait été plus représentative des conditions expérimentales. Bien qu'il soit difficile de présumer de l'influence des effets de variation de densité (variations induites par la dilatation et le mélange des gaz, pas par des effets aérodynamiques) sur le déroulement des calculs, on peut tout de même supposer qu'en travaillant avec des masses volumiques plus petites dans le gaz, on obtiendrait un film de vapeur plus épais, et donc un gradient thermique plus faible dans le film de vapeur. A priori, une épaisseur de film plus importante devrait conduire essentiellement à une masse de liquide évaporée plus faible, mais ne devrait pas avoir d'influence importante sur la surchauffe de la goutte pendant l'impact.

Enfin, il est possible que la convergence de la simulation numérique de l'impact ne soit pas parfaite. En effet, comme les temps de calcul sont importants, il n'a pas encore été possible de faire une étude de convergence sur le cas du rebond d'une goutte en régime de Leidenfrost. Une simulation numérique d'un impact avec un maillage $128 \times 512$ est actuellement en cours pour y remédier. C'est sans doute l'accumulation des effets décrits qui contribuent à la sur-estimation de l'échauffement de la goutte.

Chapitre 5

# Conclusion

Nous avons présenté dans cette thèse une étude sur la simulation numérique directe de la vaporisation de gouttes en régime de Leidenfrost. Le régime de Leidenfrost est un régime dans lequel les gouttes se vaporisent en lévitant au-dessus d'une plaque chaude. Effectuer des simulations numériques directes de ce phénomène s'est avéré être un challenge difficile du point de vue des méthodes numériques. De nombreux développements ont été effectués et couplés afin de capturer avec précision et finesse ce phénomène insolite.

L'originalité de ce travail réside dans le développement de méthodes de calcul permettant d'effectuer des simulations multi-échelles dans lesquelles la dynamique de la goutte, les phénomènes thermiques, le mélange des gaz, et les changements de phase sont tous résolus simultanément sur une même grille de calcul localement très raffinée près de la paroi chaude. De plus la modélisation des changements de phase utilisée dans ce travail s'appuie sur les principes fondamentaux de la thermodynamique classique, sans qu'il ait été nécessaire d'avoir recours à des lois supplémentaires issues de la théorie cinétique des interfaces en déséquilibre thermodynamique.

Le formalisme qui en résulte est parfaitement clair et ne souffre pas du problème de surdétermination inhérent aux méthodes de calcul utilisant des lois d'évaporation valides dans les conditions de non-équilibre thermodynamique. En contrepartie, la méthode de calcul développée dans cette étude ne peut fonctionner correctement que si tous les couches limites aux abords des interfaces sont correctement résolues afin que les échanges à l'interface et les changements de phase soient correctement calculés. La méthode proposée ici est donc exigeante en termes de résolution numérique mais elle permet d'effectuer des simulations prédictives sans qu'il soit nécessaire d'ajuster des paramètres ad hoc.

Ce manuscrit débute avec une étude bibliographique sur l'effet Leidenfrost, plusieurs travaux expérimentaux traitent de ce sujet. Cette étude bibliographique a permis d'effectuer une revue des différents régimes existant pour les impacts de gouttes sur les parois chaudes. Nous avons également présenté et commenté quelques études numériques traitant de la vaporisation de gouttes en régime de Leidenfrost, bien qu'elles soient beaucoup moins nombreuses que les études expérimentales.

La méthode Level Set utilisée dans cette étude pour suivre l'interface entre le liquide et le gaz est ensuite détaillée. La méthode Ghost Fluid qui permet d'imposer les conditions de saut appropriées à l'interface est également présentée dans le cadre d'un couplage avec les équations de Navier-Stokes incompressibles. Une étude détaillée sur le calcul des termes visqueux lorsque la viscosité est discontinue à la traversée de l'interface a été effectuée. Nous établissons l'équivalence entre les deux méthodes de calcul existantes dans la littérature pour calculer ces termes visqueux dans le cadre de la Ghost Fluid Method (équivalence formelle mais également du point de vue de la précision numérique). Néanmoins un examen attentif de ces deux méthodes met en évidence leur inadéquation pour traiter des problèmes pour lesquels la vitesse serait discontinue (changement de phase) et la discrétisation temporelles des termes visqueux seraient implicites.

La présente étude nécessitant l'utilisation de grilles très raffinées près de la paroi chaude, une dis-

crétisation temporelle implicite des termes visqueux est absolument indispensable. Aussi une troisième méthode adaptée à une discrétisation temporelle implicite des termes visqueux et à la présence de changement de phase a été mise au point pour les besoins des simulations à effectuer par la suite. Les trois méthodes existantes (ainsi que la Delta Function Method) sont ensuite comparées avec succès (bien que la nouvelle méthode soit un peu moins précise que les deux autres) sur deux cas-tests d'ascension de bulles.

Les algorithmes de résolution des transferts thermiques, des transferts de masse et des changements de phase sont ensuite présentés. Dans le cadre de la Ghost Fluid Method, les méthodes GFTSB développée dans [29] et GFTSE développée dans [96] pour traiter respectivement de l'ébullition et de l'évaporation de gouttes sont présentées. Considérant que l'ébullition et l'évaporation sont deux phénomènes intervenant dans la vaporisation en régime de Leidenfrost, les deux méthodes se sont avérées insuffisantes pour traiter l'effet Leidenfrost dans toute sa complexité.

Une nouvelle méthode hybride GFTSEB a donc été mise au point. La spécificité de cette nouvelle méthode réside dans sa capacité à capturer spontanément la transition entre le régime d'évaporation et le régime d'ébullition. Pour se faire, il a été nécessaire d'implémenter une nouvelle méthode de discrétisation spatiale issue des travaux de *Papac et al.* [77] pour la résolution d'équations de Poisson ou d'Helmoltz avec une condition limite de Robin sur une interface immergée. La méthode GFTSEB est ensuite testée et comparée à la méthode GFTSE sur des simulations d'évaporation de gouttes en mouvement. Le potentiel de cette nouvelle méthode pour traiter du problème de l'évaporation au niveau de la ligne de contact d'une goutte posée sur une paroi chaude est également mis en évidence.

Enfin nous présentons dans une dernière partie les simulations de vaporisation et de rebond de gouttes en régime de Leidenfrost qui ont été effectuées durant cette thèse. Dans cette partie, l'adéquation de l'algorithme GFTSEB à la prise en compte de la vaporisation en régime de Leidenfrost est clairement mise en évidence. Grâce à la finesse des résolutions utilisées, les simulations effectuées permettent de capturer et de visualiser très clairement la formation du film de vapeur, en résolvant avec précision les profils de vitesse, de température et de fraction massique aux très petites échelles intervenant dans le film de vapeur. Des comparaisons avec les résultats expérimentaux présentés dans [20] sont effectuées pour plusieurs nombres de Weber.

Les comparaisons sont probantes sur les grandeurs dynamiques (diamètre d'étalement de la goutte, coefficient de restitution de la vitesse de la goutte, formation ou pas d'un satellite après le rebond de la goutte). Des comparaisons entre les expériences et les simulations sur les grandeurs thermiques sont également présentées. Bien que qualitativement cohérente (l'augmentation de l'échauffement des gouttes avec le nombre de Weber incident est bien reproduit par les simulations), les prédictions numériques s'avèrent moins bonnes sur ces grandeurs, puisque l'échauffement des gouttes pendant l'impact qui a été mesuré dans les simulations est plus important que celui mesuré dans les expériences. Plusieurs explications à ce désaccord entre les résultats expérimentaux et les résultats des simulations sont proposées afin d'envisager les perspectives de cette étude.

Cette étude ouvre d'ailleurs de nombreuses perspectives. En premier lieu, si le modèle de changement de phase développé est particulièrement adapté au phénomène étudié, il convient tout de même d'améliorer le modèle physique utilisé sur plusieurs autres points, comme la prise en compte des phénomènes de variations de densité en fonction de la température et de la fraction massique. Un autre axe d'amélioration important serait de tenir compte des variations de tension de surface avec la température. En effet, les simulations ont clairement mis en évidence de forts écarts de température le long de l'interface, notamment pendant la phase d'étalement de la goutte. Le développement d'un algorithme capable de

tenir compte de la convection Marangoni semble donc pertinent.

Enfin, des études 3D semblent également nécessaires pour deux raisons. Tout d'abord cela permettrait de tenir compte dans les simulations de l'influence du mouvement tangentiel des gouttes par rapport à la plaque chaude pour être plus près des conditions expérimentales. Comme il a été dit précédemment ce mouvement tangentiel peut avoir une influence sur la composition du film de vapeur, qui, si c'était le cas, pourrait n'être que partiellement saturé. La composition du film de vapeur influe de façon directe sur l'échauffement de la goutte puisqu'elle modifie la température de l'interface liquide-gaz. Aussi ce phénomène est une piste sérieuse pour expliquer les différences entre les simulations et les expériences sur les échauffements de gouttes pendant l'impact. Enfin des simulations 3D permettraient également d'étudier le régime de Splashing qui survient à des nombres de Weber plus élevés.

Annexe A

# Résolution d'un système linéaire avec une décomposition LU

L'objectif de cette partie est d'exposer l'algorithme de décomposition LU d'une matrice tridiagonale et l'algorithme de résolution du système linéaire avec cette décomposition LU. Soient $\mathcal{B}$ le second membre et $\mathcal{A}$ la matrice du système linéaire à résoudre.

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_1^m & \mathcal{A}_1^+ & 0 & 0 & ... & ... & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{A}_2^- & \mathcal{A}_2^m & \mathcal{A}_2^+ & 0 & ... & ... & 0 & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & 0 & ... & ... & 0 & \mathcal{A}_{N_{xy}-1}^- & \mathcal{A}_{N_{xy}-1}^m & \mathcal{A}_{N_{xy}-1}^+ \\ 0 & 0 & 0 & ... & ... & 0 & 0 & \mathcal{A}_{N_{xy}}^- & \mathcal{A}_{N_{xy}}^m \end{pmatrix} \qquad \mathcal{X} = \begin{pmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ ... \\ u_{i,j} \\ ... \\ u_{N_x,N_y} \end{pmatrix}$$

En posant $l = i + (j-1)N_x$ où $N_x$ est le nombre de points du domaine suivant la direction $\vec{x}$, les coefficients s'écrivent de la façon suivante :

$$\begin{cases} \mathcal{B}_l &= u_{i,j}^m - \Delta\tau \; H(\phi_{i,j}) \; \dfrac{\partial}{\partial y} u^m \Big|_{i,j} \; ny_{i,j} \\ \mathcal{A}_l^+ &= H(\phi_{i,j}) \; H(nx_{i,j}) \; \dfrac{\Delta\tau}{\Delta x_i} \\ \mathcal{A}_l^- &= H(\phi_{i,j}) \; (1 - H(nx_{i,j})) \; \dfrac{\Delta\tau}{\Delta x_{i-1}} \\ \mathcal{A}_l^m &= 1 - \mathcal{A}_l^+ - \mathcal{A}_l^- \\ \mathcal{X}_l &= u_{i,j} \end{cases} \tag{A.1}$$

La matrice du système linéaire étant tridiagonale, la forme de la décomposition $\mathcal{LU}$ est connue. $\mathcal{L}$ est une matrice triangulaire inférieure à deux diagonales et $\mathcal{U}$ triangulaire supérieure à deux diagonales et dont les coefficients sur la diagonale du milieu valent 1.

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} \mathcal{L}_1^m & 0 & 0 & ... & ... & 0 \\ \mathcal{L}_2^- & \mathcal{L}_2^m & 0 & ... & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & ... & 0 & \mathcal{L}_{N_{xy}-1}^- & \mathcal{L}_{N_{xy}-1}^m & 0 \\ 0 & ... & 0 & 0 & \mathcal{L}_{N_{xy}}^- & \mathcal{L}_{N_{xy}}^m \end{pmatrix} \qquad \mathcal{U} = \begin{pmatrix} 1 & \mathcal{U}_1^+ & 0 & ... & ... & 0 \\ 0 & 1 & \mathcal{U}_2^+ & ... & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & ... & ... & 0 & 1 & \mathcal{U}_{N_{xy}-1}^+ \\ 0 & ... & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Les coefficients des matrices $\mathcal{L}$ et $\mathcal{U}$ se calculent facilement à l'aide d'un algorithme de récurrence [18] très rapide. L'étape ① donne le point de départ de la récurrence, et les coéfficients suivants sont déduits dans l'étape ②.

$$① \begin{cases} \mathcal{L}_1^m = \mathcal{A}_1^m \\ \mathcal{U}_1^+ = \dfrac{\mathcal{A}_1^+}{\mathcal{A}_1^m} \end{cases} \qquad ② \begin{cases} \mathcal{L}_l^- = \mathcal{A}_l^- \\ \mathcal{L}_l^m = \mathcal{A}_l^m - \mathcal{A}_l^- \ \mathcal{A}_{l-1}^+ \\ \mathcal{U}_l^+ = \dfrac{\mathcal{A}_l^+}{\mathcal{L}_l^m} \end{cases}$$

Résoudre le système linéaire $\mathcal{A}\mathcal{X} = \mathcal{B}$ équivaut à résoudre le système $\mathcal{L}\mathcal{U}\ \mathcal{X} = \mathcal{B}$. En posant $\mathcal{Y} = \mathcal{U}\mathcal{X}$ la résolution du système se décompose en deux étapes, l'étape de « Descente »dans laquelle le système $\mathcal{L}\mathcal{Y} = \mathcal{B}$ est résolu et une fois le vecteur $\mathcal{Y}$ connu, l'étape de « Remontée »où le système linéaire $\mathcal{U}\mathcal{X} = \mathcal{Y}$ est résolu également.

Etape de « Descente » :

$$① \ \mathcal{L}\mathcal{Y} = \mathcal{B} \begin{cases} \mathcal{Y}_1 = \dfrac{\mathcal{B}_1}{\mathcal{L}_1^m} \\ \mathcal{Y}_l = \dfrac{\mathcal{B}_l - \mathcal{L}_l^- \ \mathcal{Y}_{l-1}}{\mathcal{L}_l^m} \qquad l = 2...N_{xy} \end{cases}$$

Etape de « Remontée » :

$$② \ \mathcal{U}\mathcal{X} = \mathcal{Y} \begin{cases} \mathcal{X}_{N_{xy}} = \mathcal{Y}_{N_{xy}} \\ \mathcal{X}_l = \mathcal{Y}_l - \mathcal{U}_l^+ \ \mathcal{X}_{l+1} \qquad l = (N_{xy}-1)...1 \end{cases}$$

# Bibliographie


[1] K. Anders, N. Roth, and A. Frohn. The velocity change of ethanol droplets during collision with a wall analysed by image processing. Experiments in Fluids, 15 :91–96, 1993. (Cité en pages 14 et 156.)

[2] T. D. Aslam. A partial differential equation approach to multidimensional extrapolation. Journal of Computational Physics, 193 :349–355, 2003. (Cité en pages 79, 91, 93, 95, 96, 105, 106, 108 et 109.)

[3] A. Benkenida. Développement et validation d'une méthode de simulation d'écoulements diphasiques sans reconstruction d'interface. Application à la dynamique des bulles de Taylor. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1999. (Cité en page 32.)

[4] J. D. Bernardin and I. Mudawar. Film boiling heat transfer of droplet streams and sprays. International Journal of Heat and Mass Transfer, 40 :2579–2593, 1996. (Cité en page 14.)

[5] V. Bertola. Effect of polymer concentration on the dynamics of dilute polymer solution drops impacting on heated surfaces in the leidenfrost regime. Experimental Thermal and Fluid Science, 2013. (Cité en page 16.)

[6] A. L. Biance, C. Clanet, and D. Quéré. Leidenfrost drops. Physics of Fluids, 15 :1632–1637, 2003. (Cité en page 7.)

[7] T. Bonometti. Développement d'une méthode de simulation d'écoulements à bulles et à gouttes. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005. (Cité en page 32.)

[8] R. Borghi and M. Champion. Modélisation et théorie des flammes. Editions TECHNIP, 2000. (Cité en page 116.)

[9] R. Borghi and M. Destriau. La combustion et les flammes. Editions TECHNIP, 1995. (Cité en page 116.)

[10] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. Journal of Computational Physics, 100 :335–354. (Cité en pages 18 et 45.)

[11] G. Castanet, T. Liénart, and F. Lemoine. Dynamics and temperature of droplets impacting onto a heated wall. International Journal of Heat and Mass Transfer, 52 :670–679, 2009. (Cité en page 15.)

[12] F. Celestini, T. Frisch, and Y. Pomeau. Take off of small leidenfrost droplets. Physical Review Letters, 034501, 2012. (Cité en page 8.)

[13] S. L. Chiu and T. H. Lin. Experiment on the dynamics of a compound drop impinging on a hot surface. Physics of Fluids, 17(122103), 2005. (Cité en pages 14 et 16.)

[14] A. J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. Journal of Computational Physics, 2 :12–26, 1967. (Cité en page 38.)

[15] M. François andS. 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. Journal of Computational Physics, 213 :141–173, 2006. (Cité en page 45.)

[16] G. E. Cossali, M. Marengo, and M. Santini. Single drop empirical models for spary impact on solid walls : A review. Atomization and Sprays, 15 :699–736, 2004. (Cité en pages 10 et 13.)

[17] Frédéric Couderc. Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux. PhD thesis, ENSAE, 2007. (Cité en page 28.)

[18] I. Danaila, F. Hecht, and O. Pironneau. Simulation numérique en $C^{++}$. Dunod, 2003. (Cité en page 166.)

[19] J. Dewitte. Modélisation de l'impact d'un brouillard de gouttes en évaporation et sous pression sur une paroi chauffée. PhD thesis, École Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace (ENSAE), 2006. (Cité en pages 10, 11 et 13.)

[20] Pierre DUNAND. Etude de l'impact de goutte sur une paroi chaude en régime de Leidenfrost. PhD thesis, EMMA, 2012. (Cité en pages 11, 129, 131, 138, 150, 153, 157 et 162.)

[21] B. Duret, G. Luret, J. Réveillon, T. Menard, A. Berlemont, and F.-X. Démoulin. Dns analysis of turbulent mixing in two-phase flows. International Journal of Multiphase Flow, 40 :93–105, 2012. (Cité en page 89.)

[22] A. Esmaeeli and G. Tryggvason. Computations of film boiling. part i : Numerical method. International Journal of Heat and Mass Transfer, 47 :5451–5461, 2004. (Cité en page 89.)

[23] A. Esmaeeli and G. Tryggvason. Computations of film boiling. part ii : multi-mode film boiling. International Journal of Heat and Mass Transfer, 47 :5463–5476, 2004. (Cité en page 89.)

[24] A. Esmaeeli and G. Tryggvason. A front tracking method for computations of boiling in complex geometries. International Journal of Multiphase Flow, 30 :1037–1050, 2004. (Cité en page 89.)

[25] R. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows. Journal of Computational Physics, 152 :457–492. (Cité en pages 45, 60 et 105.)

[26] H. Fujimoto, Y. Oku, T. Ogihara, and H. Takuda. Hydrodynamics and boiling phenomena of water droplets impinging on hot solid. International Journal of Mulitiphase Flow, 36 :620–642, 2010. (Cité en page 13.)

[27] Y. Ge and L.S. Fan. Three-dimensional simulation of impingement of a liquid droplet on a flat surface in the leidenfrost regime. Physics of Fluids, 17 :027104, 2005. (Cité en page 89.)

[28] Y. Ge and L.S. Fan. Three-dimensional direct numerical simulation of film boiling contact of moving particle and liquid droplet. Physics of Fluids, 18 :117104, 2006. (Cité en page 89.)

[29] F. Gibou, L. Chen, and D. Nguyen ans S. banerjee. A level set based sharp interface method for the multiphase incompressible navier-stokes equations with phase change. Journal of Computational Physics, 222 :536–555, 2007. (Cité en pages 85, 86, 89, 90, 113, 115 et 162.)

[30] F. Gibou, R. Fedkiw, L. Cheng, and M. Kang. A second-order-accurate symmetric discretization of the poisson equation on irregular domains. Journal of Computational Physics, 176 :205–227, 2002. (Cité en pages 79, 86, 91, 92, 95 et 96.)

[31] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics : Theory and application to non-spherical stars. Monthly Notices of the Royal Astromical Society, 181 :375–389, 1977. (Cité en page 29.)

[32] A. Giovannini and B. Bédat. Transfert de chaleur. Cépaduès Editions, 2012. (Cité en page 82.)

[33] J. Glimm, J. Grove, B. Lindquist, O. McBryan, and G. Tryggvason. The bifurcation of tracked scalar waves. SIAM Journal Scientific and Statistical Computing, 1 :61–79. (Cité en page 29.)

[34] B. S. Gottfried and K. J. Bell. Film boiling of spheroidal droplets. Industrial and Engineering Chemestry Fundamentals, 5 :561–568, 1966. (Cité en pages 6 et 7.)

[35] B. S. Gottfried, C. J. Lee, and K. J. Bell. The leidenfrost phenomenon : film boiling of liquid droplets on a flat plate. I. Journal of Heat and Mass Transfer, 9 :1167–1188, 1966. (Cité en pages 6 et 7.)

[36] M. Gradeck, N. Seiler, P. Ruyer, and D. Maillet. Heat transfer for leidenfrost drops bouncing onto a hot surface. Experimental Thermal and Fluid Science, 47 :14–25, 2013. (Cité en page 7.)

[37] V. Groendes and R. Mesler. Measurement of trnsient surface temperatures beneath leidenfrost water drops. Proceedings of the $7^{th}$ International Heat Transfer Conference (Munich, Germany), 21 :131–136, 1982. (Cité en pages 18 et 20.)

[38] 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. Journal of Computational Physics, 152 :423–456, 1999. (Cité en pages 31 et 45.)

[39] S. Hardt and F. Wondra. Evaporation model for interfacial flows based on a continuum-field representation of the source terms. Journal of Computational Physics, 227 :5871–5895, 2008. (Cité en page 89.)

[40] F. Harlow and J. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. The Physics of Fluids, 8(12) :2182–2189, 1965. (Cité en pages 29, 30 et 31.)

[41] A. Harten, B. Engquist, S. Osher, and S. Chakravarthy. Uniformly high-order accurate essentially non-occillatory schemes iii. Journal of Computational Physics, 71 :231–303, 1987. (Cité en page 36.)

[42] A. Harten and S. Osher. Uniformly high-order accurate non-occillatory schemes i. SIAM Journal on Numerical Analysis, 24 :279–309, 1987. (Cité en page 36.)

[43] D. J. E. Harvie. A hydrodynamic and thermodynamic simulation of droplet impacts on hot surfaces. PhD thesis, University of Sydney (NSW), 1999. (Cité en page 18.)

[44] D. J. E. Harvie and D. F. Fletcher. A hydrodynamic and thermodynamic simulation of droplet impact on hot surfaces, part i : theoretical model. International Journal of Heat and Mass Transfer, 44 :2633–2642, 2001. (Cité en page 18.)

[45] D. J. E. Harvie and D. F. Fletcher. A hydrodynamic and thermodynamic simulation of droplet impact on hot surfaces, part ii : validation and application. International Journal of Heat and Mass Transfer, 44 :2643–2659, 2001. (Cité en page 18.)

[46] N. Hatta, H. Fujimoto, K. Kinoshita, and H. Takuda. Three-dimensional simulation of impingement of a liquid droplet on a flat surface in the leidenfrost regime. Physics of Fluids, 17, 1997. (Cité en page 153.)

[47] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. Journal of Computational Physics, 39 :201–225. (Cité en page 31.)

[48] J. G. Hnat and J. D. Buckmaster. Spherical cap bubbles and skirt formation. Physics of Fluids, 19, 1976. (Cité en page 74.)

[49] R. W. Houim and K. K. Kuo. A ghost fluid method for compressible reacting flows with phase change. Journal of Computational Physics, DOI : http ://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2012.09.022, 2012. (Cité en page 89.)

[50] M. Ishii and T. Hibiki. Thermo-Fluid Dynamics of two-phase flows. Springer, 2011. (Cité en page 19.)

[51] 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. Journal of Computational Physics, 169 :624–651, 2001. (Cité en page 89.)

[52] G. S. Jiang and C. W. Shu. Efficient implementation of weighted essentially non-oscillatory schemes. Journal of Computational Physics, 126 :202–228, 1996. (Cité en pages 34 et 36.)

[53] C. Josserand, L. Lemoyne, R. Troeger, and S. Zaleski. Droplet impact on a dry surface : triggering the splash with a small obstacle. Journal of Fluid Mechanics, 524 :47–56, 2005. (Cité en page 31.)

[54] D. Juric and G. Tryggvason. Computations of boiling flows. I. Journal of Multiphase Flow, 24 :387–410, 1998. (Cité en pages 19, 85 et 88.)

[55] M. Kang, R. Fedkiw, and X. D Liu. A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow. Journal of Computational Physics, 15 :323–360, 2000. (Cité en pages 33, 34, 44, 45, 49, 57, 58 et 114.)

[56] A. Karl and A. Frohn. Experimental investigation of interaction processes between droplets and hot walls. Physics of Fluids, 12 :785–796, 1999. (Cité en pages 14, 15 et 156.)

[57] D. B. Kothe. Perspective on eulerian finite volume methods for incompressible interfacial flows. Los Alamos National Laboratory, 1999. (Cité en page 28.)

[58] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. Journal of Computational Physics, 113 :134–147, 1994. (Cité en pages 31 et 45.)

[59] B. Lalanne, S. Tanguy, L. Rueda-Villegas, and F. Risso. On the computation of viscous terms for incompressible two-phase flows with level set/ ghost fluid method. Soumis au Journal of Computational Physics. (Cité en page 52.)

[60] J. G. Leidenfrost. On the fixation of water in diverse fire. International Journal of Heat and Mass Transfer, 9 :1153–1166, 1966. (Cité en page 6.)

[61] X.-D Liu, R. Fedkiw, and M. Kang. A boundary condition capturing method for poisson's equation on irregular domains. Journal of Computational Physics, 160 :151–178, 2000. (Cité en pages 45 et 93.)

[62] X. D. Liu, S. Osher, and T. Chan. Weighted essentially non-oscillatory schemes. Journal of Computational Physics, 115 :200–212, 1994. (Cité en pages 36 et 60.)

[63] L. B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. The Astronomical Journal, 82(12) :1013–1024, 1977. (Cité en page 29.)

[64] C. Ma and D. Bothe. Numerical modeling of thermocapillary two-phase flows with evaporation using a two-scalar approach for heat transfer. Journal of Computational Physics, http ://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2012.09.011, 2012. (Cité en page 89.)

[65] M. Marengo and C. Tropea. Aufprall von tropfen auf flüssigkeitsfilme. Zwischenbericht zum Forschungsvorhaben, 1999. (Cité en page 10.)

[66] C. Min and F. Gibou. Robust second order accurate discretization of the multi-dimensional heaviside and dirac delta functions. Journal of Computational Physics, 227 :1432–1443, 2008. (Cité en pages 96, 98, 103, 104 et 150.)

[67] Chohong Min and Frédéric Gibou. Geometric integration over irregular domains with application to level-set methods. J. of Computational Physics, 226 :1432–1443, 2007. (Cité en page 100.)

[68] D. W. Moore. The boundary layer on a spherical gas bubble. Journal of Fluid Mechanics, 16 :161–176, 1963. (Cité en page 72.)

[69] CHR. Mundo, M. Sommerfeld, and C. Tropea. Droplet-wall collisions : Experimental studies of the deformation and breakup process. International Journal of Multiphase Flow, 21 :151–173, 1994. (Cité en page 9.)

[70] T. G. Myers and P. F. Charpin. A mathematical model of the leidenfrost effect on an axisymmetric droplet. Physics of Fluids, 21(063101), 2009. (Cité en page 8.)

[71] D. Nguyen, R. Fedkiw, and M. Kang. A boundary condition capturing method for incompressible flame discontinuities. Journal of Computational Physics, 172 :71–98, 2001. (Cité en pages 113 et 115.)

[72] V. Nikolayev. Dynamics of the triple contact line on a non-isothermal heater at partial wetting. Physics of Fluids, 22 :082105, 2010. (Cité en pages 123 et 125.)

[73] N. Nikolopoulos, A. Theodorakakos, and G. Bergeles. A numerical investigation of the evaporation process of a liquid droplet impinging onto a hot substrate. International Journal of Heat and Mass Transfer, 50 :303–319, 2006. (Cité en page 21.)

[74] W. F. Noh and P. Woodward. Slic (simple line interface calculation). Lecture Notes in physics, Proceedings of the $5^{th}$ International Conference on Numerical methods in Fluid Dynamics 1976, 59 :330–340. (Cité en page 31.)

[75] D. L. R. Oliver and J. N. Chung. Flow about a fluid sphere al low and moderate reynolds numbers. Journal of Fluid Mechanics, 177 :1–18, 1987. (Cité en page 72.)

[76] S. Osher and J. A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on hamilton-jacobi formulations. Journal of Computational Physics, 79 :12–49. (Cité en page 32.)

[77] J. Papac, F. Gibou, and C. Ratsch. Efficient symmetric discretization for the poisson, heat and stefan-type problems with robin boundary conditions. Journal of Computational Physics, 2009. (Cité en pages 79, 94, 95, 96, 98, 100 et 162.)

[78] Y. Pomeau, M. Le Berre, F. Celestini, and T. Frisch. The leidenfrost effect : From quasi-spherical droplets to puddles. Comptes Rendus Mecanique, 340 :867–881, 2012. (Cité en page 8.)

[79] S. Popinet. An accurate adaptative solver for surface-tension-driven interfacial flows. Journal of Computational Physics, 228 :5838–5866, 2009. (Cité en page 31.)

[80] S. Popinet and S. Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. International Journal of Numerical Methods for Fluids, 30 :775–793, 1999. (Cité en page 45.)

[81] E. G. Puckett, A. Almgren, J. Bell, D. Marcus, and W. Rider. A high-order projection method for tracking interfaces in variable density incompressible flows. Journal of Computational Physics, 130 :269, 1997. (Cité en page 31.)

[82] Y. M. Qiao and S. Chandra. Boiling of droplet on a hot surface in low gravity. International Journal of Heat and Mass Transfer, 39 :1379–1393, 1995. (Cité en pages 14, 18 et 20.)

[83] W. J. Rider and D. B. Kothe. Reconstructing volume tracking. Journal of Computational Physics, 141 :112–152, 1998. (Cité en page 31.)

[84] W. Samenfink. Grundlegende Untersuchung zur Tropfeninteraktion mit Schubspannungsgetriebenen Wanfilmen. PhD thesis, Universität Karlsruhe, 1997. (Cité en pages 10 et 11.)

[85] R. Scardovelli and S. Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface flow and interfacial flow. Annual Review Fluid Mechanics, 31 :567–603, 1999. (Cité en page 31.)

[86] J. Schlottke and B. Weigand. Direct numerical simulation of evaporating droplets. Journal of Computational Physics, 227 :5215â5237, 2008. (Cité en page 89.)

[87] P. Schmidt and G. Knauss. Prallzerstaübung von flüssigkeiten bei nichtbenetzung. Chem. Ing. Tech., 48, 1976. (Cité en page 9.)

[88] J. A. Sethian. Turbulent combustion in open and closed vessels. Journal of Computational Physics, 54 :425–456, 1984. (Cité en page 32.)

[89] J. A. Sethian. Level set methods and fast marching methods. Cambridge University Press, 1996. (Cité en page 33.)

[90] G. Son and V. K. Dhir. Numerical simulation of film boiling near critical pressures with a level set method. Journal of Heat Tansfer, 120, 1998. (Cité en page 88.)

[91] G. Son and V. K. Dhir. Numerical simulation of nucleate boiling on a horizontal surface at high heat fluxes. Journal of Heat and Mass Tansfer, 51 :2566–2582, 2008. (Cité en page 89.)

[92] G. Son and V. K. Dhir. Three dimensional simulation of saturated film boiling on a horizontal cylinder. Journal of Heat and Mass Tansfer, 51 :1156–1167, 2008. (Cité en page 89.)

[93] C. D. Stow and M. G. Hadfield. An experimental investigation of fluid flow resulting from the impact a water drop with an unyielding dry surface. Proc. Royal Society London, A373 :419–441, 1981. (Cité en page 10.)

[94] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. Journal of Computational Physics, 114 :146–159, 1994. (Cité en pages 33, 45 et 53.)

[95] M. Sussman, K. M. Smith, M. Y. Hussaini, m. Ohta, and R. Zhi-Wei. A sharp interface method for incompressible two-phase flow. Journal of Computational Physics, 221 :469–505, 2007. (Cité en pages 45, 51 et 57.)

[96] S. Tanguy, T. Ménard, and A. Berlemont. A level set method for vaporizing two-phase flows. J. of Computational Physics, 221 :837–853, 2007. (Cité en pages 86, 90, 91, 92, 115, 118, 119, 120, 123 et 162.)

[97] S. Tanguy, M. Sagan, B. Lalanne, F. Couderc, and C. Colin. Benchmarks and numerical methods for boiling flow simulations. Submitted to Journal of Computational Physics, 2013. (Cité en pages 91, 113, 115 et 116.)

[98] Sébastien Tanguy. Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques. PhD thesis, Faculté des sciences de l'université de Rouen, 2004. (Cité en pages 35 et 70.)

[99] G. Tomar, G. Biswas, A. Sharma, and A. Agrawal. Numerical simulation of bubble growth in film boiling using a coupled level-set and volume-of-fluid method. Physics of Fluids, 17 :112103, 2005. (Cité en page 89.)

[100] S. O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. Journal of Computational Physics, 100 :25–37. (Cité en pages 29 et 45.)

[101] R. J. Le Veque. Numérical methods for conservation laws. Birkhauser, Basel, 1992. (Cité en page 33.)

[102] L. H. J. Wachters and N. A. J. Westerling. The heat transfer from a hot wall to impinging water drops in the spheroidal state. Chem. Eng. Sci., 21 :1047–1056, 1966. (Cité en pages 18 et 20.)

[103] P. Walzer. Zerstäuben von flüssigkeiten. Chem. Ing. Tech., 62 :983–994, 1980. (Cité en page 9.)

[104] P. Walzer. Zerteilgrenze beim tropfenprall. Chem. Ing. Tech., 52 :338–339, 1980. (Cité en page 9.)

[105] A. B. Wang, C. H. Lin, and C. C. Chen. The critical temperature of dry impact for tiny droplet impinging on a heated surface. Physics of Fluids, 12 :1622–1625, 2000. (Cité en page 6.)

[106] S. Welch and J. Wilson. A volume of fluid based method for fluid flows with phase change. Journal of Computational Physics, 160 :662–682, 2000. (Cité en page 89.)

[107] T. Ye, W. Shyy, and J. N. Chung. A fixed-grid, sharp-interface method for bubble dynamics and phase change. Journal of Computational Physics, 174 :781–815, 2001. (Cité en page 89.)

[108] D. L. Youngs. Time dependent multi-material flow with large fluid distorsion. Morton and Baynes, 1982. (Cité en page 31.)

[109] S. T. Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. Journal of Computational Physics, 31 :335–362. (Cité en page 32.)

[110] S. Zhang and G. Gogos. Film evaporation of a spherical droplet over a hot surface : fluid mechanics and heat/mass transfer analysis. Journal of Fluid Mechanics, 222 :543–563, 1990. (Cité en page 7.)