École Doctorale n° 531 – Sciences, Ingénierie et Environnement

**Spécialité doctorale "Mécanique"**

Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle (MSME) – CNRS UMR 8208

Thèse pour obtenir le grade de

## Docteure de l'Université Gustave Eiffel

Présentée et soutenue par

**Nour El Houda Djaballah**

Le 15 Janvier 2026

# MÉTHODES À DEUX CHAMPS POUR LA RÉSOLUTION NUMÉRIQUE SUR MAILLAGES STRUCTURÉS DU TRANSFERT DE MASSE ENTRE FLUIDES IMMISCIBLES : VALIDATION ET COMPARAISON AU MODÈLE À 1-FLUIDE

Devant le jury :

| | | | |
|---|---|---|---|
| **Eric Climent** | PU | IMFT-Univ de Toulouse | Rapporteur |
| **Adrien Toutant** | MCF-HDR | PROMES-Univ Perpignan | Rapporteur |
| **François-Xavier Demoulin** | PU | CORIA-Univ Rouen | Examinateur |
| **Ivana Vinkovic** | PU | LMFA-Univ Claude Bernard | Examinatrice |
| **Mathilde Tavares** | MCF | $\partial$'Alembert-Univ Sorbonne | Examinatrice |
| **Stéphane Vincent** | PU | MSME-Univ Gustave Eiffel | Directeur |
| **Eric Chénier** | PU | MSME-Univ Gustave Eiffel | Co-Directeur |
| **Benoît Trouette** | MCF-HDR | MSME-Univ Gustave Eiffel | Encadrant |
| **Can Savas Selçuk** | MCF | MSME-Univ Gustave Eiffel | Encadrant |

## Résumé

Les transferts de masse aux interfaces des écoulements diphasiques à phases dispersées sont omniprésents dans de nombreuses applications industrielles et environnementales. La compréhension de la physique associée à ces phénomènes est fondamentale pour leur modélisation. La complexité de ces processus réside principalement dans deux aspects numériques, dont la maîtrise est essentielle pour une investigation numérique fiable et précise de ces phénomènes :

1. la nécessité de recourir à des maillages très fins pour résoudre la fine épaisseur de la couche limite massique.
2. la physique raide de ces phénomènes, induite par la discontinuité des variables à l'interface séparant les fluides, gouvernée par la condition de solubilité des espèces.

Ce travail de thèse se concentre particulièrement sur le second aspect. Il vise à proposer une approche originale de modélisation, à la fois simple et efficace, dédiée aux interfaces résolues sur une grille cartésienne. Elle permet de traiter rigoureusement cette physique discontinue, intrinsèque aux transferts de masse. Ces problématiques sont généralement abordées à travers deux grandes catégories d'approches : les modèles à 1-fluide et à 2-fluides, chacune présentant ses avantages et ses limitations. Le présent travail s'inscrit dans la seconde catégorie et s'attache à offrir une résolution phasique tout en tirant parti des avantages des approches à 1-fluide. Le modèle développé a été implémenté dans le code maison Fugu. Il s'appuie sur la méthode Ghost-Fluid pour le traitement des flux de diffusion, combinée à un schéma de transport géométrique pour l'advection du champ de concentration.

La qualité des solutions obtenues avec cette méthode numérique est comparée à celle du modèle à 1-fluide, également implémenté dans le code Fugu, dans le cadre de cette thèse. À cette fin, plusieurs cas académiques 2D et 3D sont étudiés, couvrant les trois modes de transfert de masse (interne, externe et conjugué) à travers des gouttes ou bulles statiques, en rotation et en translation, pour lesquels des solutions analytiques sont disponibles. D'autres simulations 3D, intégrant la dynamique de l'écoulement via la résolution des équations de Navier–Stokes, sont réalisées en reprenant des configurations issues de la littérature, caractérisées par des nombres adimensionnels tels que le nombre d'Eötvös ($Eo$) et le nombre de Morton ($Mo$). L'évaluation de la précision de la méthode développée ainsi que celle du modèle à 1-fluide, a été effectuée en analysant la convergence du champ de concentration et du nombre de Sherwood ($Sh$).

À la lumière des résultats de ces simulations numériques, il ressort que l'approche proposée dans ce travail de thèse permet de produire une solution respectant fidèlement le caractère discontinu de la physique mise en jeu, tout en offrant une qualité numérique supérieure à celle du modèle à 1-fluide. Dans l'ensemble des configurations étudiées, cette méthode assure un gain de précision d'au moins une décade, y compris sur des maillages grossiers, confirmant ainsi la robustesse et l'efficacité de la stratégie de modélisation développée.

## Abstract

Mass transfer at the interfaces of dispersed two-phase flows is ubiquitous in numerous industrial and environmental applications. Understanding the physics associated with these phenomena is fundamental to their modeling. The complexity of these processes lies mainly in two numerical aspects, which must be properly addressed to enable a reliable and accurate numerical investigation of these phenomena :

1. the prohibitive resolution requirements associated with the extremely thin mass boundary layer.
2. the stiff physics of these phenomena, induced by the discontinuity of the variables at the interface separating the fluids, governed by the solubility condition of the species.

This thesis focuses particularly on the second aspect. It aims to propose an original modeling approach, both simple and efficient, dedicated to resolved interfaces on a Cartesian grid. This approach enables a rigorous handling of the discontinuous physics inherent to mass transfer. Such problems are typically treated using two main categories of modeling strategies : 1-fluid and 2-fluid formulations, each presenting specific advantages and limitations. The present work belongs to the second category and seeks to provide a phasic description while taking advantage of the benefits of 1-fluid approaches. The proposed model has been implemented in the in-house code Fugu. It relies on the Ghost-Fluid Method for the treatment of diffusive fluxes and employs a geometric transport scheme for the advection of the concentration field.

The quality of the solutions obtained with our numerical method has been compared to that of the 1-fluid model, also implemented in Fugu code, as part of this work. To this end, 2D and 3D academic test cases were considered, covering the three modes of mass transfer (internal, external, and conjugate) through static, rotating, and translating drops or bubbles, for which analytical solutions are available. Other 3D simulations including flow dynamics through the solution of the Navier–Stokes equations were conducted, based on configurations from the literature characterized by dimensionless numbers such as the Eötvös number ($Eo$) and the Morton number ($Mo$). The accuracy of the developed method, as well as that of the 1-fluid model, was assessed by analyzing the convergence of the concentration field and of the Sherwood number ($Sh$).

In light of the results of these numerical simulations, the proposed approach is shown to produce solutions that faithfully capture the discontinuous nature of the underlying physics while providing superior numerical accuracy compared to the 1-fluid model. Across all the configurations studied, This method provides at least one order of magnitude improvement in accuracy, even on coarse meshes, confirming the robustness and efficiency of the developed modeling strategy.

*À toutes les personnes dont la présence et le soutien ont rendu cette expérience si foisonnante.*

## Remerciements

En premier lieu, je tiens à remercier chaleureusement l'ensemble de mon équipe d'encadrement. Merci pour l'intérêt que vous avez porté à ce travail, pour vos interventions toujours pertinentes et pour la richesse de nos échanges, à la fois constructifs et inspirants. À mon directeur de thèse, Stéphane VINCENT, je souhaite t'adresser mes remerciements les plus sincères. Je te suis profondément reconnaissante de m'avoir accordé l'opportunité de concrétiser mon objectif d'intégrer le monde passionnant de la recherche, avec ses défis stimulants. Merci pour tes encouragements, véritables sources de motivation, pour tes remarques pertinentes et tes conseils avisés, toujours empreints de bienveillance. Je tiens également à exprimer mon indicible gratitude à mon co-directeur, Éric CHÉNIER. Tu as été un allié précieux tout au long de cette aventure scientifique. Ton accompagnement constant, ta rigueur et tes orientations m'ont permis de progresser et d'approfondir mes réflexions. Travailler avec toi fut une expérience à la fois humaine et intellectuelle d'une grande richesse. J'ai énormément appris avec toi et, pour cela, je ne te remercierai jamais assez. Mes remerciements s'adressent aussi à Benoît TROUETTE, pour son aide précieuse, son expertise et sa disponibilité, même pendant les vacances ! Travailler à tes côtés m'a permis de progresser et de renforcer mes compétences tant en méthodes numériques qu'en développement de code. Je remercie également Can SELÇUK, pour sa pertinence, ses réflexions aiguisées et ses orientations.

Je souhaite également adresser mes remerciements les plus sincères aux membres du jury pour avoir accepté d'évaluer ce travail. Votre expertise, vos remarques et vos suggestions contribueront à enrichir le fruit de ces années de recherche et le rendent d'autant plus précieux à mes yeux.

Je n'oublie pas mes collègues, amis et professeurs de l'équipe TCM du laboratoire MSME, avec qui j'ai partagé d'agréables moments. Un clin d'œil particulier à mes colocataires de bureau, pour votre bonne humeur et pour nos nombreuses discussions passionnantes et parfois TRÈS drôles, je pense "aux petits cailloux". Bref, avec vous, je n'aurais rien changé à cette expérience, que vous avez su rendre si riche en souvenirs et en émotions.

Une pensée toute particulière pour ma très chère famille : mon papa, ma maman, ma sœur et mes frères. Merci pour tout, votre amour, votre soutien indéfectible et votre sollicitude constante.

Un immense merci à ma seconde famille de cœur, "Djema family", pour leur présence permanente, leur chaleur, leur bienveillance inestimable, ainsi que pour les repas toujours aussi succulents !

Je n'oublie pas toutes les personnes extraordinaires croisées au fil de cette aventure, celles qui ont partagé avec moi les hauts et les bas de ces années, sous toutes leurs facettes : amis, connaissances, voisins... À chacun d'entre vous, merci.

Last but not least, je pense à deux personnes sans qui je ne serais sans doute pas en train

d'écrire ces lignes pour clore ce chapitre : moi-même et ma grande sœur ! Dr. Anissa. À moi-même, pour avoir été intrépide, pour avoir su transformer les difficultés en apprentissages, conserver un regard à la fois combatif et lucide, et savourer jusqu'au bout chacun des défis. Et à toi, ma sœur de cœur, pour ce que tu es : une présence affable, une douceur au quotidien et une force de rebond quand la vie l'exige.

# Table des matières

**Table des figures** **15**

**Table des tableaux** **22**

**Nomenclature** **23**

**1 Introduction et contexte général** **27**
1.1 Applications environnementales . . . . . 28
1.1.1 Lavage de l'air : . . . . . 29
1.1.2 Traitement des eaux usées : . . . . . 30
1.2 Applications industrielles . . . . . 30
1.2.1 Sécurité nucléaire : . . . . . 30
1.2.2 Procédés chimiques et pétrochimiques : . . . . . 31
1.3 Contexte de la thèse : lavage de l'air . . . . . 31
1.3.1 Pour les particules micrométriques . . . . . 32
1.3.2 Pour les nanoparticules ($d_0 \leq 0.001\mu$m) et les gaz . . . . . 34
1.4 Structure du manuscrit . . . . . 35

**2 État de l'art sur le transfert de masse** **37**
2.1 Transferts de masse dans les écoulements diphasiques à phase dispersée . . 38
2.2 Transfert de matière par diffusion moléculaire . . . . . 40
2.2.1 Modèles prédictifs du coefficient de transfert de masse . . . . . 42
2.2.1.1 Bulle ou goutte isolée . . . . . 44
2.2.1.2 Ensembles de bulles/gouttes (colonnes, réacteur) . . . . . 46
2.2.2 Théorie du transfert de masse . . . . . 47
2.2.2.1 Théorie du film (Lewis et Whitman [95]) . . . . . 48
2.2.2.2 Théorie de pénétration (Higbie [73]) . . . . . 49
2.2.2.3 Théorie de renouvellement à l'interface (Danckwerts [32]) 51
2.2.2.4 Théorie de la divergence de surface (McCready, Vassiliadou et Hanratty [110]) . . . . . 52
2.2.3 Quels sont les différents modes de transferts de masse ? . . . . . 53

2.3 Investigations expérimentales . . . 54
2.3.1 Mesure des champs de concentration autour des bulles . . . 55
2.3.1.1 Fluorescence Induite par Laser (LIF) . . . 55
2.3.1.2 Interférence par Holographie Laser (LHI) . . . 56
2.3.2 Mesure des variations de volume, surface ou pression des bulles . . . 56
2.3.2.1 Mesure de la différence de pression . . . 57
2.3.2.2 Mesure de variation de volume et de taille de bulles . . . 57
2.4 Investigations numériques . . . 59
2.4.1 Résolution de transfert de masse dans une unique phase . . . 60
2.4.2 Méthode de Lattice Boltzmann pour le transfert de masse . . . 61
2.4.3 Modèle sous-maille pour le transfert de masse . . . 62
2.4.4 Modèle continu : à 1-fluide pour le transfert de masse . . . 63
2.4.5 Modèle discontinu : à deux champs pour le transfert de masse . . . 64
2.5 Apport du présent travail . . . 65

**3 Modélisation des écoulements diphasiques avec transfert de masse 67**
3.1 Modélisation par phase : modèle 2-fluides pour les interfaces résolues . . . 69
3.1.1 Bilan de conservation de la masse . . . 70
3.1.2 Bilan de quantité de mouvement . . . 71
3.1.3 Bilan de conservation des espèces . . . 72
3.1.4 Relations d'équilibre à l'interface . . . 73
3.2 Modèle à 1-fluide pour l'ensemble des équations de conservation . . . 74
3.2.1 Transport de l'interface . . . 75
3.2.2 Conservation de la masse : $\Phi_p = \rho_p$ . . . 77
3.2.3 Conservation de la quantité de mouvement : $\Phi_p = \rho_p \mathbf{u}_p$ . . . 78
3.2.4 Conservation des espèces : $\Phi_p = C_p$ . . . 79
3.2.5 Filtrage des équations du formalisme à 1-fluide . . . 81

**4 Méthodes numériques pour la modélisation de transferts aux interfaces 84**
4.1 Méthodes de localisation d'interface . . . 85
4.1.1 Méthode Volume of Fluid (VOF) pour la capture d'interface . . . 87
4.1.1.1 Reconstruction géométrique d'interface . . . 88
4.1.1.2 Advection géométrique d'interface . . . 91
4.2 Résolution numérique du transfert de masse à travers des interfaces résolues 94
4.2.1 Discrétisation temporelle du formalisme de mélange des équations de Navier-Stokes . . . 94
4.2.2 Discrétisation spatiale des équations du modèle 1-fluide : méthode des Volumes Finis (VF) . . . 94

4.2.2.1 Discrétisation des équations de Navier-Stokes . . . . . 95
4.2.2.2 Discrétisation de l'équation de concentration des espèces . 98
4.2.3 Traitement des conditions aux limites . . . . . 100
4.2.4 Solveur de résolution des équations de conservation . . . . . 101
4.2.5 Test de validation de l'équation de diffusion stationnaire 1D dans une formulation à 1-fluide . . . . . 103

**5 Modèle à 2-champs pour le problème d'advection diffusion : résultats et validation** **107**
5.1 Méthode Ghost-Fluid pour le transfert de masse . . . . . 108
5.2 Mise en place du modèle à deux champs . . . . . 111
5.2.1 Traitement du problème de pure diffusion . . . . . 112
5.2.1.1 Formalisme général pour le terme de diffusion : . . . . . 113
5.2.1.2 Application du formalisme général au cas particulier . . . 117
5.2.2 Résultats de validation du modèle de diffusion pure . . . . . 120
5.2.2.1 Étude de convergence sur le champ de concentration . . . 123
5.2.2.2 Étude de convergence sur le nombre de Sherwood . . . . . 123
5.2.3 Traitement du terme d'advection . . . . . 126
5.2.4 Validation de la modélisation du problème d'advection-diffusion . . 130
5.3 Splitting de l'équation de transfert de masse . . . . . 133
5.3.1 Schéma discret à deux champs . . . . . 134
5.3.1.1 Approximation par la condition de saut . . . . . 136
5.3.1.2 Approximation par une combinaison des cellules voisines $C_J$ 137
5.3.1.3 Approximation par une concentration interfaciale $C_{p_J^M,\Gamma_{IJ}}$ . 137
5.3.2 Schéma discret à deux champs pour l'équation de diffusion de masse 140
5.3.3 Résultats des différents schémas temporels pour la diffusion instationnaire . . . . . 144
5.3.3.1 Transfert extérieur $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$ . . . . . 145
5.3.3.2 Transfert intérieur $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \ll 1$ . . . . . 150
5.3.3.3 Transfert conjugué $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \simeq 1$ . . . . . 155
5.3.4 Résultats de validation des schémas de transport . . . . . 160
5.3.4.1 Rotation en bloc d'un disque 2D . . . . . 160
5.3.4.2 Translation de bulle 3D . . . . . 170
5.4 Simulations 3D du transfert de masse à travers une bulle en ascension . . . 176

**Conclusion générale** **180**

**Perspectives** **183**

**Annexes** **185**
Annexe A . . . . . 185
Annexe B . . . . . 187
Annexe C . . . . . 189
Annexe D . . . . . 191
Annexe E . . . . . 198
Annexe F . . . . . 201

**Références** **204**

# Table des figures


1.1 Secteurs d'application du transfert de masse : (a) et (b) environnement [9, 48], (c) industrie pétrochimique [145], (d) sécurité nucléaire [121]. . . . . 29
1.2 Schéma illustratif de la capture de polluants par un spray. . . . . 32
1.3 Illustration du mécanisme de capture de polluants par impaction. . . . . 33
1.4 Illustration du mécanisme de capture de polluant par interception. . . . . 34
1.5 Illustration du mécanisme de capture de polluant par diffusion moléculaire 34

2.1 Illustrations des échangeurs de matière gaz-liquide : (a) colonne à bulles, (b) colonne à pulvérisations [173]. . . . . 39
2.2 Représentation du modèle du double film . . . . . 49
2.3 Représentation du modèle de pénétration de Higbie . . . . . 50
2.4 Profils de concentration suivant les différents modes de transfert de masse. 54

3.1 Illustrations de phénomènes diphasiques à phase dispersée : (a) déferlement d'une vague avec cascade d'échelles interfaciales [161], (b) pulvérisation d'un jet liquide à l'aide d'un système de spray [111], (c) impact de goutte générant des structures diphasiques éjectées [143], (d) fragmentation primaire d'un jet liquide [24]. . . . . 68
3.2 Illustration du domaine diphasique $\Omega$ composé des sous-domaines $\Omega_1$ et $\Omega_2$, séparés par l'interface $\Gamma$, avec les normales sortante $\mathbf{n}_1$ et entrante $\mathbf{n}_2$ du sous-domaine à $\Omega_1$. . . . . 69

4.1 Comparaison schématique des principales méthodes numériques de localisation d'interface : (a) distribution de la fraction volumique dans le modèle VOF, (b) fonction distance utilisée en méthode Level-Set, (c) marqueurs lagrangiens mobiles de la méthode Front-Tracking. . . . . 87
4.2 Illustration des reconstructions géométriques : VOF-SLIC et VOF-PLIC. . 89
4.3 Illustration de méthodes géométriques d'advection de l'interface . . . . . 91
4.4 Advection de la fraction volumique par évaluation des flux . . . . . 93
4.5 Illustration 2D de la grille décalée . . . . . 95
4.6 Disposition des nœuds de vitesse sur une grille décalée vitesse-pression pour la composante u . . . . . 96

4.7 Disposition des nœuds de pression sur une grille décalée vitesse-pression pour le champ de pression . . . . . 97
4.8 Illustration des nœuds fictifs de vitesse sur une grille décalée vitesse-pression 101
4.9 Illustration de la structure de la matrice creuse à résoudre. 5 diagonales non nulles en rouge et en vert pour les composantes de vitesse $u$ et $v$. Les diagonales en noir représentent le couplage entre les composantes de vitesses $u$ et $v$. Les diagonales en magenta pour le gradient de pression et en cyan pour la divergence du champ de vitesse [140]. . . . . 103
4.10 Représentation du domaine d'étude d'un processus de diffusion unidimensionnel et instationnaire. . . . . 104
4.11 Validation du modèle à 1-fluide : (a) Profil de concentration dans la direction $\mathbf{e}_x$, (b) Évolution de l'erreur relative $\|E_2\|_{\text{rel}}$ pour différents maillages. 105
4.12 Validation du modèle à un fluide : (a) Profil de concentration dans la direction $\mathbf{e}_x$ ; (b) Évolution de l'erreur relative $\|E_2\|_{\text{rel}}$ pour différents maillages. 106

5.1 Schéma de la méthode Ghost Fluid avec une interface située en $x_I$, séparant le domaine $\Omega^{(1)} = \Omega_\ell$ (phase liquide) du domaine $\Omega^{(2)} = \Omega_g$ (phase gazeuse) 110
5.2 Illustration des paramètres utilisés dans le formalisme général appliqué au traitement du terme de diffusion par la méthode Ghost-Fluid. . . . . 114
5.3 Illustrations des intersections de domaines dans deux contextes : (gauche) domaine global avec interface, (droite) interface entre deux cellules. . . . . 114
5.4 Stencil de discrétisation . . . . . 117
5.5 Illustration de la géométrie et du maillages du domaine de calcul pour une résolution $d_0/\Delta x = 8$. . . . . 121
5.6 Profil de concentration en fonction du rayon pour un mode de transfert extérieur : comparaison des résultats numériques des modèles à deux champs et à 1-fluide ($1F$), bruts et traités, avec la solution exacte pour une résolution $d_0/\Delta x = 8$. . . . . 122
5.7 Résultats de convergence du champ de concentration obtenu par les deux approches numériques : à 1-fluide et à 2-fluides . . . . . 124
5.8 Évolution temporelle du nombre de Sherwood pour $d_0/\Delta x = 8$ à 256 d'une bulle en translation uniforme : modèles 2-fluides (a) et 1-fluide (b). Les traits discontinus correspondent au calcul avec le dénominateur $C_g/\text{He}$, et les symboles carrés au calcul avec le dénominateur $\langle C_{\Gamma,\ell}\rangle$. . . . . 126
5.9 Résultats de convergence du nombre de Sherwood ($Sh$) obtenu par les deux approches numériques : à 1-fluide et à 2-fluides . . . . . 127
5.10 Illustration des deux volumes de contrôle selon la position de l'interface . . 128

5.11 Illustration de la géométrie, du champ initial de la fraction volumique et du maillage cartésien du domaine de calcul 2D . . . . . 130
5.12 Évolution temporelle du nombre de Sherwood pour $d_0/\Delta x = 8$ à 256 d'une bulle en translation uniforme : modèles 2-champs (a) et 1-fluide (b). Les traits discontinus correspondent au calcul avec le dénominateur $C_g/\mathrm{He}$, et les symboles carrés au calcul avec le dénominateur $C_{\Gamma,\ell}$. . . . . 131
5.13 Évolution temporelle du nombre de Sherwood pour $d_0/\Delta x = 16$ : comparaison des méthodes un fluide et deux fluides avec différents schémas de transport. . . . . 132
5.14 Exemple de cellule où le liquide est la phase majoritaire $C_I = C_\ell$. La phase gazeuse minoritaire dans la cellule $I$ nécessite une reconstruction. . . . . 134
5.15 Schéma illustratif des mailles $J$ et $K$ voisines de la cellule $I$ dont les concentrations sont utilisées pour remplir la phase minoritaire de la maille $I$ . . . 138
5.16 Schéma illustratif du remplissage de la phase minoritaire de la maille $I$ à partir des concentrations interfaciales issues des contributions des mailles voisines $J$ et $K$ . . . . . 139
5.17 Illustration des volumes de contrôle utilisés pour l'intégration temporelle de l'équation de diffusion . . . . . 141
5.18 Résultats de convergence du champ de concentration pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert extérieur à travers une bulle statique. . 145
5.19 Évolution du nombre de Sherwood au cours du temps pour un transfert éxtérieur à travers une bulle : comparaison des solutions numériques pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$. . . . . 148
5.20 Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$, exprimé à l'aide du modèle continu, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert extérieur à travers une bulle. Les traits continus indiquent la version $C_g/\mathrm{He}$ et les pointillés la version $\langle C_{\ell,\Gamma}\rangle$. . . . . 149
5.21 Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$, exprimé à l'aide du modèle discret, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert extérieur à travers une bulle. Les traits continus indiquent la version $C_g/\mathrm{He}$ et les pointillés la version $\langle C_{\ell,\Gamma}\rangle$ . . . . . 150
5.22 Profil de concentration en fonction du rayon pour un transfert intérieur : comparaison des résultats numériques des modèles à deux champs et à 1-fluide ($1F$), traités, avec la solution exacte pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$. 151
5.23 Résultats de convergence du champ de concentration pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert intérieur à travers une goutte statique. 152

5.24 Évolution du nombre de Sherwood au cours du temps pour un transfert intérieur à travers une goutte : comparaison des solutions numériques pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$. . . . . 153
5.25 Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$, exprimé à l'aide du modèle continu, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert intérieur à travers une goutte. . . . . 154
5.26 Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$, exprimé à l'aide du modèle discret, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert intérieur à travers une goutte. . . . . 154
5.27 Profil de concentration en fonction du rayon pour un transfert de matière conjugué : comparaison des résultats numériques des modèles à deux champs et à un fluide ($1F$) traités, avec la solution exacte pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$. . . . . 155
5.28 Résultats de convergence du champ de concentration pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert conjugué à travers une goutte statique. 156
5.29 Évolution du nombre de Sherwood au cours du temps pour un transfert conjugué à travers une goutte : comparaison des solutions numériques pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$. . . . . 157
5.30 Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$, exprimé à l'aide du modèle continu, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert conjugué à travers une goutte. . . . . 157
5.31 Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$, exprimé à l'aide du modèle discret, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert conjugué à travers une goutte. . . . . 158
5.32 Illustration du domaine de calcul et du champ de concentration au temps de simulation $t = 3.2, \mathrm{s}$, pour une résolution $d_0/\Delta x = 16$. . . . . 161
5.33 Evolution temporelle du nombre de Sherwood pour le cas d'une bulle 2D en rotation, pour une résolution $d_0/\Delta x = 8$. . . . . 162
5.34 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue à partir de la relation de saut de Henry : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert extérieur à travers une bulle en rotation. Les traits continus indiquent la version $C_g$/He et les pointillés la version $\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle$. . . . 163
5.35 Résultats de convergence du flux diffusif (a) et de la concentration interfaciale $\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle$ (b), pour les approches numériques : à 1-fluide et à deux champs, associées aux différentes variantes de schémas temporels. . . . . 164

5.36 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des cellules voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert extérieur à travers une bulle en rotation. Les traits continus indiquent la version $C_g$/He et les pointillés la version $\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle$. . . . 164

5.37 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert extérieur à travers une bulle en rotation. Les traits continus indiquent la version $C_g$/He et les pointillés la version $\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle$. . . . . 165

5.38 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue à partir de la relation de saut de Henry : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert intérieur à travers une goutte en rotation. . . . . 166

5.39 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des cellules voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert intérieur à travers une goutte en rotation. . . . . 167

5.40 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert intérieur à travers une goutte en rotation. . . . . 168

5.41 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue à partir de la relation de saut de Henry : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert intérieur à travers une goutte en rotation. . . . . 169

5.42 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des cellules voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert conjugué à travers une goutte en rotation. . . . . 169

5.43 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert conjugué à travers une goutte en rotation. . . . . 170

5.44 Illustration de la géométrie 3D et du maillage du domaine de calcul pour une résolution $d_0/\Delta x = 8$. . . . . 171
5.45 Illustration de la géométrie 3D et du maillage du domaine de calcul pour une résolution $d_0/\Delta x = 8$. . . . . 172
5.46 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert conjugué à travers une goutte en rotation. . . . . 172
5.47 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert conjugué à travers une goutte en rotation. . . . . 173
5.48 Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert conjugué à travers une goutte en rotation. . . . . 174
5.49 Résultats de convergence du flux diffusif (a) et de la concentration interfaciale (b), pour les approches numériques : à 1-fluide et à deux champs, associées aux différentes variantes de schémas temporels. . . . . 174
5.50 Diagramme de Clift, Grace et Weber [30] des régimes de bulles montantes dans un liquide au repos, avec identification des cas simulés 1 et 2. . . . . 177
5.51 Représentation de la topologie de l'interface et du champ de vitesse (a), et la distribution logarithmique du champ de concentration (b), pour la configuration de bulle montante du cas 1. . . . . 178
5.52 Représentation de la topologie de l'interface et du champ de vitesse (a), et la distribution logarithmique du champ de concentration (b), pour la configuration de bulle montante du cas 2. . . . . 178
5.53 Étude de l'influence du pas de temps sur la convergence du champ de concentration, pour le cas de bulles statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. . . . . 185
5.54 Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$ obtenu par une approximation continue, pour le cas de bulles statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. . . . . 186

5.55 Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$ obtenu par une approximation discrète, pour le cas de bulles statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. . . . . 186
5.56 Étude de l'influence du pas de temps sur la convergence du champ de concentration, pour le cas de goutte statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. . . . . 187
5.57 Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$ obtenu par une approximation continue, pour le cas de goutte statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. . . . . 188
5.58 Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$ obtenu par une approximation discrète, pour le cas de goutte statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. . . . . 188
5.59 Étude de l'influence du pas de temps sur la convergence du champ de concentration, pour le cas de transfert conjugué : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. . . . . 189
5.60 Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$ obtenu par une approximation continue, dans le cas du transfert conjugué : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. . . . . 190
5.61 Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$ obtenu par une approximation discrète, dans le cas du transfert conjugué : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. . . . . 190
5.62 Topologie de l'interface et distribution logarithmique du champ de concentration pour trois configurations de bulles montantes. . . . . 199
5.63 Champs de vitesse (a) et de concentration (b) autour d'une bulle montante. 201
5.64 Comparaison de l'évolution temporelle du nombre de Sherwood dans les deux configurations d'écoulement : bulle montante (a) et bulle immobilisée (b). . . . . 202
5.65 Évolution temporelle du nombre de Sherwood pour trois résolutions spatiales, dans les deux configurations d'écoulement : bulle montante (a) et bulle immobilisée (b). . . . . 203

# Table des tableaux


2.1 Constantes de la loi de Henry et leurs conversions. D'après Sander [134] . 42
2.2 Constantes de la loi de Henry pour des gaz dissous dans l'eau à 25 °C. D'après Sander [133] . . . . . 42

3.1 Explicitation des termes $\Phi, \Phi_V, \Phi_S$ . . . . . 70

5.1 Paramètres adimensionnels décrivant l'écoulement et le transfert de masse des configurations simulées. . . . . 176
5.2 Comparaison des nombres de Reynolds ($Re$) de nos simulations aux références théoriques et numériques . . . . . 179
5.3 Comparaison des nombres de Sherwood ($Sh$) de nos simulations aux références théoriques et numériques . . . . . 179

5.4 Paramètres adimensionnels décrivant l'écoulement et le transfert de masse des configurations simulées. . . . . 198
5.5 Nombres de Reynolds ($Re$) et de Sherwood ($Sh$) en fonction de la résolution spatiale pour les paramètres de simulation du cas 1. . . . . 199
5.6 Nombres de Reynolds ($Re$) et de Sherwood ($Sh$) en fonction de la résolution spatiale pour les paramètres de simulation du cas 2. . . . . 200
5.7 Nombres de Reynolds ($Re$) et de Sherwood ($Sh$) en fonction de la résolution spatiale pour les paramètres de simulation du cas 3. . . . . 200

# Nomenclature

## Symboles

| | | |
|---|---|---|
| $C$ | Concentration | $[\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}]$ |
| $D$ | Coefficient de diffusion | $[\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$ |
| $d_0$ | Diamètre goutte | [m] |
| $g$ | Accélération de la pesanteur | $[\text{m} \cdot \text{s}^{-2}]$ |
| $He$ | Constante de Henry | [–] |
| $\overline{I}$ | Tenseur identité | [–] |
| $\mathbf{J}$ | Flux de diffusion | $[\text{mol} \cdot \text{m}^{-2} s^{-1}]$ |
| $k$ | Coefficient de transfert de masse local | $[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$ |
| $M$ | Masse molaire | $[\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}]$ |
| $\mathbf{n}$ | vecteur normal sortant | [–] |
| $p$ | Pression | [Pa] |
| $u$ | Vitesse | $[\text{m} \cdot s^{-}1]$ |
| $Y$ | Fraction massique | [–] |

| | | |
|---|---|---|
| $\alpha$ | Fraction volumique | [–] |
| $\mu$ | Viscosité dynamique | $[\text{Kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}]$ |
| $\rho$ | Masse volumique | $[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$ |
| $\kappa$ | Courbure de l'interface | $[\text{m}^{-1}]$ |
| $\chi$ | Fonction indicatrice de phase | [–] |
| $\delta$ | Fonction Dirac | [–] |
| $\phi$ | Fonction distance | [m] |
| $\Gamma$ | Interface | [–] |
| $\sigma$ | Tension de surface | $[\text{J} \cdot \text{m}^{-1}]$ |
| $\theta$ | Distance normalisée relative à l'interface | [–] |

| | | |
|---|---|---|
| $\delta_{ij}$ | Symbole de Kronecker | [-] |
| $\overline{\tau}_p$ | Tenseur des contraintes de la phase | [Pa] |
| $\overline{S}$ | Tenseur des contraintes totales | $[\mathrm{Kg} \cdot \mathrm{m}^{-1} \cdot \mathrm{s}^{-2}]$ |

## Indices et exposants

| | |
|---|---|
| $CSF$ | Continuum Surface Force |
| $g$ | gaz |
| $\ell$ | liquide |
| $\Gamma$ | interface |
| M | phase majoritaire dans les mailles mixtes |
| m | phase minoritaire dans les mailles mixtes |

## Abréviations

| | |
|---|---|
| $CFL$ | Courant–Friedrichs–Lewy |
| $DNS$ | Direct Numerical Simulation |
| $FT$ | Front-Tracking |
| $LS$ | Level Set |
| $VOF$ | Volume of Fluid |
| $CLS-VOF$ | Coupled Level-Set/Voulume-of fluid |
| $GFM$ | Ghost Fluid Method |
| $LBM$ | Latice Boltzmann Method |
| $LHI$ | Interférence par Horlogerie Laser |
| $LIF$ | Fluorescence Induite par Laser |
| $PLIF$ | Planar Laser Induced Fluorescence |
| $LVIRA$ | Least-squares Volume-of-Fluid Interface Reconstruction Algorithm |
| $ELVIRA$ | Efficient Least-squares Volume-of-Fluid Interface Reconstruction Algorithm |
| $SLIC$ | Simple Line Interface Calculation |
| $PLIC$ | Picewise Linear Interface Calculation |
| $MAC$ | Marker-And-Cell |
| $SGS$ | Sub Grid Scale |
| $VF$ | Volumes finis |

# Nombres adimensionnels

| | |
|---|---|
| $Eo = \frac{\rho g d_0^2}{\sigma}$ | Nombre d'Eotvos |
| $Mo = \frac{g\mu^4}{\rho\sigma^3}$ | Nombre de Morton |
| $Pe = \frac{u d_0}{D_\ell}$ | Nombre de Peclet |
| $Re = \frac{\rho u d_0}{\mu}$ | Nombre de Reynolds |
| $Sc = \frac{\mu}{\rho D}$ | Nombre de Schmidt |
| $Sh = \frac{k_\ell d_0}{D}$ | Nombre de Sherwood |
| $We = \frac{\rho u d_0^2}{\sigma}$ | Nombre de Weber |

CHAPITRE 1

# Introduction et contexte général

## Structure du chapitre


1.1 Applications environnementales . . . . . 28
1.1.1 Lavage de l'air : . . . . . 29
1.1.2 Traitement des eaux usées : . . . . . 30
1.2 Applications industrielles . . . . . 30
1.2.1 Sécurité nucléaire : . . . . . 30
1.2.2 Procédés chimiques et pétrochimiques : . . . . . 31
1.3 Contexte de la thèse : lavage de l'air . . . . . 31
1.3.1 Pour les particules micrométriques . . . . . 32
1.3.2 Pour les nanoparticules ($d_0 \leq 0.001\mu$m) et les gaz . . . . . 34
1.4 Structure du manuscrit . . . . . 35

# Introduction

Les écoulements diphasiques gaz-liquide à phase dispersée, tels que les systèmes à bulles ou à gouttelettes, suscitent un intérêt considérable dans de nombreuses applications en raison de leurs excellentes performances en matière de transfert aux interfaces. Dans ce type de configuration, une multitude de structures dispersées (bulles ou gouttes) est finement répartie au sein d'une phase continue. Cette dispersion génère une aire interfaciale importante, maximisant ainsi la zone de contact entre les phases, ce qui favorise l'efficacité des échanges, notamment le transfert de masse. L'idée est donc d'intensifier les interactions entre les deux phases immiscibles pour permettre un contact efficace qui favorisera le déplacement de substances d'une phase à l'autre, telles que les polluants, les gaz ou les composés chimiques. Ainsi, certains processus, comme la capture de composants, les réactions chimiques ou encore la diffusion de matière entre les phases en présence, sont optimisés. Cette caractéristique revêt une importance fondamentale dans des secteurs variés, où ces systèmes, qu'il s'agisse de nuages de bulles ou de gouttelettes de spray, sont mis en œuvre pour répondre à des enjeux environnementaux ou améliorer l'efficacité de procédés industriels : nucléaire, chimique, pétrochimique, etc. Selon les besoins spécifiques de l'application, ces systèmes diphasiques à phase dispersée se présentent principalement sous deux configurations : d'une part, la pulvérisation d'un liquide en fines gouttelettes dans une phase continue, qui peut être gazeuse ou constituée d'un liquide non miscible. D'autre part, l'injection de bulles de gaz au sein d'une phase liquide continue. Chacune de ces configurations permet de tirer parti des caractéristiques interfaciales pour maximiser les transferts et répondre aux exigences des procédés visés, fondamentalement basés sur le transfert de masse.

## 1.1 Applications environnementales

De nombreux procédés dédiés au contrôle de la qualité de l'environnement font appel à des écoulements à phase dispersée afin de profiter de leurs propriétés particulièrement intéressantes, notamment en matière de transfert de masse. Ce dernier désigne le déplacement de substances telles que des polluants, des gaz ou des composés chimiques entre deux phases immiscibles, essentiellement par diffusion moléculaire. Il constitue le mécanisme fondamental sur lequel reposent ces diverses applications environnementales. L'optimisation de ce mécanisme est cruciale pour améliorer l'efficacité des procédés mis en œuvre, en particulier ceux visant à préserver ou restaurer la qualité de l'environnement. Cela s'illustre notamment dans les domaines de la dépollution atmosphérique, appelée également *"lavage*

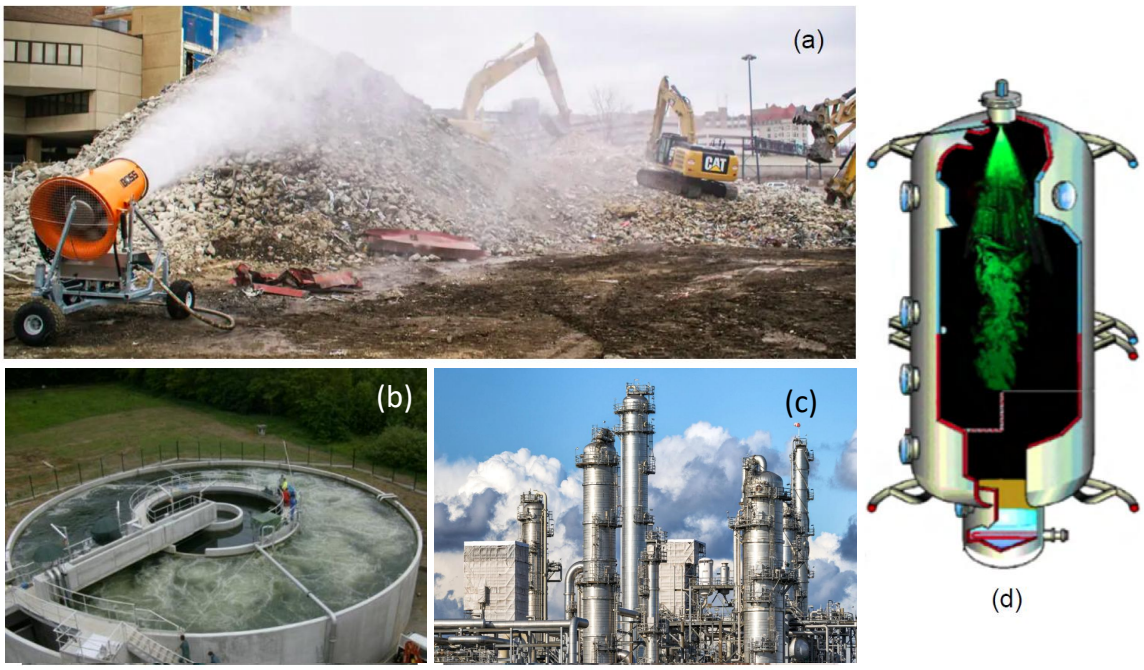



FIGURE 1.1 – Secteurs d'application du transfert de masse : (a) et (b) environnement [9, 48], (c) industrie pétrochimique [145], (d) sécurité nucléaire [121].

*de l'air"* [25, 39, 98, 142] et du traitement des eaux [130], où la performance des systèmes utilisés dépend étroitement de l'intensité des phénomènes de transfert de masse entre les phases présentes dans l'écoulement.

### 1.1.1 Lavage de l'air :

Dans le cadre de la dépollution atmosphérique, divers dispositifs sont déployés afin de capter les contaminants présents dans l'air [81, 25, 123]. Ces polluants incluent notamment les poussières, les débris toxiques, ainsi que divers polluants chimiques tels que les oxydes de soufre ($SO_2$) [5, 4], l'ammoniac ($NH_3$) [21, 22, 57], ou encore le chlorure d'hydrogène ($HCl$) [20]. L'objectif est de réduire significativement les émissions de ces substances dans l'atmosphère et d'atténuer leur impact sur la santé humaine et l'environnement. Pour répondre à cet objectif, des installations, également appelées contacteurs, à bulle ou à gouttes, sont mises en œuvre. Elles constituent une technique de dépollution efficace, reposant sur un contact optimal entre les phases pures et la phase à dépolluer. Deux configurations principales sont classiquement utilisées :

— ***Lavage par pulvérisation***, également désigné sous le terme d'*abattage humide*, il consiste à pulvériser des gouttelettes d'un solvant liquide pur ou d'une solution réactive dans un courant ascendant de gaz chargé en polluants. Ceci permet la capture, la dissolution ou la neutralisation des substances indésirables au sein de la phase

liquide. Ce type de contacteur, représenté notamment par les tours de pulvérisation (voir figure 2.1b), est principalement utilisé pour capter des effluents gazeux industriels, tels que le dioxyde de soufre $SO_2$, ainsi que pour la rétention de débris solides tels que les particules radioactives ou d'autres aérosols [39, 98] propagés dans l'environnement. On retrouve également ce mécanisme de collecte dans les dispositifs de pulvérisation sur les chantiers, visant à assainir l'environnement de travail en limitant la dispersion de poussières et de substances nocives pour les voies respiratoires [25, 81, 142, 39].

— ***Absorption par bulles***, consiste à injecter un flux ascendant de bulles de gaz contaminé, contenant des composés indésirables, dans une phase liquide continue et pure. Ce contact favorise l'absorption ou la neutralisation des espèces polluantes par transfert de masse depuis la phase gazeuse vers la phase liquide. Ce type d'opération est généralement mis en œuvre dans des colonnes à bulles (voir figure 2.1a) ou dans des dispositifs appelés cuves d'épuration [89, 147, 160, 109].

### 1.1.2 Traitement des eaux usées :

Les systèmes à bulles, tels que décrits précédemment, sont également utilisés dans les stations d'épuration des eaux usées, notamment pour assurer l'aération des bassins de traitement. L'injection de bulles de gaz favorise le transfert d'oxygène de la phase gazeuse vers la phase liquide, permettant ainsi de maintenir une concentration suffisante en oxygène dissous, indispensable au bon fonctionnement des micro-organismes épurateurs. Ces derniers jouent un rôle essentiel dans la dégradation des matières organiques et la réduction des polluants présents dans les eaux usées. Pour une présentation plus détaillée de ces procédés, le lecteur pourra se référer à l'ouvrage de référence [130].

## 1.2 Applications industrielles

### 1.2.1 Sécurité nucléaire :

Les systèmes à phase dispersée, en particulier les dispositifs de pulvérisation (sprays), constituent un élément clé des systèmes de sûreté dans l'industrie nucléaire, notamment dans la gestion des situations accidentelles. Ils assurent le contrôle des rejets radioactifs et toxiques, tels que les produits de fission et les gaz inflammables [146, 79, 137]. Déclenchés automatiquement, ils permettent la capture efficace d'aérosols et de particules radioactives (iode, césium, produits de fission, etc.) au sein de l'enceinte de confinement [120, 119, 118, 69, 84, 99], tout en réduisant les concentrations de gaz dangereux, hautement explosifs,

tels que l'hydrogène, dans cette atmosphère confinée. Par ailleurs, le lavage en cuve par injection de gaz contaminé dans un liquide, généralement de l'eau, constitue une autre méthode complémentaire utilisée dans l'industrie nucléaire. Comme évoqué précédemment, cette technique repose sur l'interaction entre les bulles de gaz contenant des débris radioactifs et la phase liquide, permettant ainsi de piéger les composants indésirables et de limiter leur rejet dans l'environnement [89].

### 1.2.2 Procédés chimiques et pétrochimiques :

Les dispositifs à bulles ou à gouttes sont au cœur de nombreux procédés chimiques et pétrochimiques. Ils sont principalement utilisés pour le transfert de composants gazeux dans un liquide, par exemple l'absorption de gaz acides dans des solutions d'amines [23]. On les retrouve également dans les tours de lavage par pulvérisation, appelées *scrubbers*, où les gaz sont purifiés par l'aspersion de fines gouttelettes de liquide, permettant d'éliminer les espèces solubles et de neutraliser les vapeurs acides telles que HCl, $SO_2$ ou $NH_3$ [20, 4, 22]. Ces systèmes sont aussi employés pour le traitement des gaz par séparation ou extraction de certains de leurs composants. D'autres procédés hydrométallurgiques exploitent de manière similaire les phénomènes de transfert de masse dans les écoulements à phase dispersée, notamment dans les procédés d'extraction liquide-liquide tel que le procédé PUREX [125, 65]. Dans ces procédés, des gouttes finement dispersées permettent de maximiser la surface de contact entre deux liquides non miscibles : l'un constitue le solvant et l'autre la phase contenant le soluté à extraire.

Dans tous ces procédés, les échanges entre les deux phases gaz-liquide sont particulièrement efficaces, notamment grâce à la grande surface d'échange, au renouvellement permanent de la surface de contact, ainsi qu'au fort gradient de concentration entre la phase "pure" et la phase "chargée".

## 1.3 Contexte de la thèse : lavage de l'air

Le présent travail de recherche s'inscrit dans une démarche à la fois fondamentale et appliquée, visant l'étude de la problématique du contrôle de la qualité de l'air, qui constitue un défi majeur dans de nombreux secteurs, tant environnementaux qu'industriels. En effet, dans les situations où l'on est confronté à des émissions de contaminants particulaires ou gazeux, le lavage de l'air, ou plus généralement la dépollution des gaz, constitue une technique d'épuration efficace pour répondre à cette problématique.

Dans cette étude, le lessivage par pulvérisation d'eau, connu sous le terme d'abattage

humide, constitue la principale méthode d'assainissement abordée. Ce procédé repose sur l'interaction entre la phase liquide dispersée et le flux gazeux contaminé, ce qui permet le piégeage de divers types d'aérosols indésirables, empêchant ainsi leur dispersion dans l'environnement [82, 100, 167, 12], comme l'illustre schématiquement la figure 1.2.

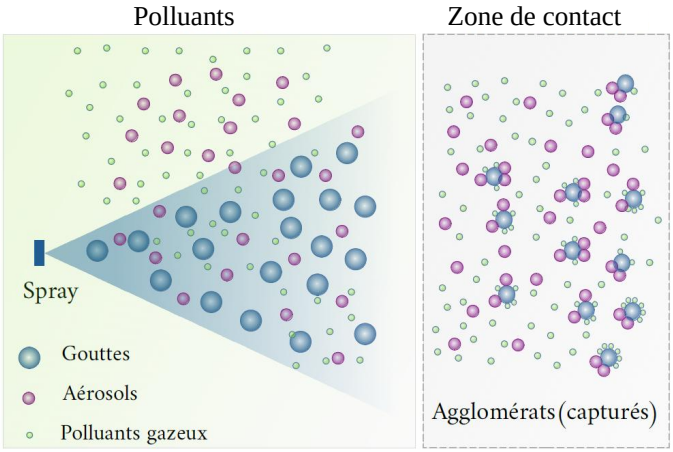



FIGURE 1.2 – Schéma illustratif de la capture de polluants par un spray.

Les principales raisons qui motivent notre intérêt pour ces dispositifs d'abattage humide résident dans leur large éventail d'applications. Comme mentionné précédemment, ils sont utilisés dans des systèmes d'aspersion destinés à réduire l'exposition à des composés nocifs, que ce soit dans des espaces confinés ou dans des environnements ouverts, tels que les chantiers de démolition ou les tunnels. Ils trouvent également des usages dans le domaine de la protection de l'environnement et dans la sécurité nucléaire, où ils jouent un rôle crucial en tant que barrière de protection. La complexité de ce procédé vient du fait qu'il repose sur des mécanismes physiques mettant en jeu des échelles très variées, allant de la dynamique globale de l'écoulement jusqu'aux phénomènes interfaciaux microscopiques. En effet, le processus de capture des polluants implique différents mécanismes de collecte dont l'efficacité dépend fondamentalement de la taille des polluants et de celle des gouttes aspergées [167].

### 1.3.1 Pour les particules micrométriques

La capture des polluants est dominée par les mécanismes inertiels basés sur le contact entre les gouttes de captage et les polluants mis en jeu, sous l'action de leur inertie. Leur collision engendre le piégeage des aérosols au niveau de l'interface des gouttes, permettant ainsi leur élimination de l'atmosphère par abattage humide. L'analyse des régimes d'écoulement

des particules est basée sur un paramètre fondamental, qui est le nombre de Stokes ($St$) particulaire. Celui-ci traduit la capacité des particules à suivre l'écoulement du fluide environnant et exprime, par définition, le rapport entre le temps de réponse de la particule aux sollicitations de l'écoulement environnant $\tau_r$ et le temps caractéristique du fluide $\tau_f$.

$$St = \frac{\tau_r}{\tau_f} \tag{1.1}$$

Ainsi, un nombre de stokes $St \gg 1$ caractérise les particules lourdes, qui sont tellement inertielles qu'elles n'ont pas le temps d'être affectées par la dynamique environnante. En revanche, plus la particule est légère, plus elle s'adapte instantanément aux éventuels changements de vitesse du fluide, son temps de relaxation $\tau_r$ est donc très faible devant le temps caractéristique de l'écoulement $\tau_f$, ce qui se traduit par un nombre de Stokes $St \ll 1$.

**Capture par impaction $St \gg 1$ :** elle représente le mécanisme dominant pour la collecte des polluants de taille supérieure à $1\mu$m. En effet, ayant une inertie supérieure à celle de la phase porteuse, leur temps de relaxation est par conséquent très grand, engendrant ainsi leur détachement des lignes de courant. De ce fait, ils impactent directement la surface des gouttes et provoquent leur collision avec le flux aspergé, tel que schématisé en figure 1.3. Ils sont ensuite entraînés par le mouvement descendant des gouttes vers le

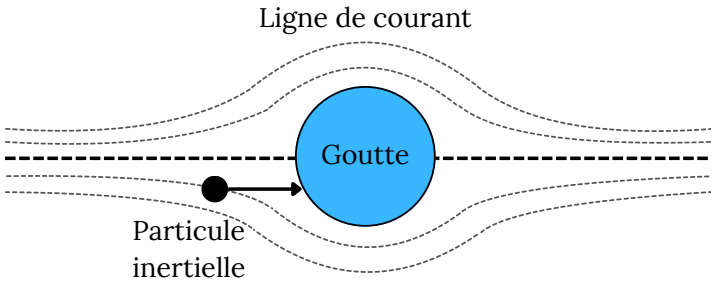



FIGURE 1.3 – Illustration du mécanisme de capture de polluants par impaction.

sol ou dans des bacs de récupération permettant leur élimination.

**Capture par interception $St \ll 1$ :** elle concerne les aérosols de taille intermédiaire, généralement compris entre $0.5\mu$m et $1\mu$m, qui se comportent comme des traceurs passifs en raison de leur faible inertie. Ces particules sont portées par les lignes de courant de l'écoulement contournant les gouttes. Toute particule située à une distance inférieure ou égale à un rayon de la surface de la goutte est captée et entraînée lors de la chute des gouttes, comme illustré en figure 1.4.

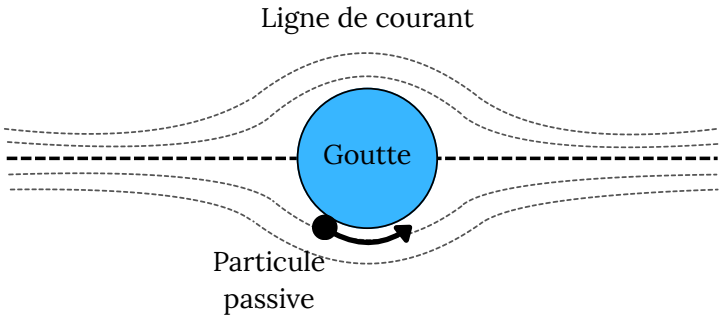



FIGURE 1.4 – Illustration du mécanisme de capture de polluant par interception.

### 1.3.2 Pour les nanoparticules ($d_0 \leq 0.001\mu$m) et les gaz

La diffusion moléculaire est le mécanisme prédominant dans le processus d'élimination des particules ultrafines, dont le diamètre moyen est inférieur à $0.001\mu$m, ainsi que des espèces gazeuses. Son efficacité augmente avec la diminution de la taille des impuretés, en raison du mouvement brownien plus intense des particules de très petite taille. Contrairement aux mécanismes inertiels qui reposent principalement sur l'inertie des particules, les nanoparticules impliquées dans ce processus de dépollution sont non-inertielles comparées à la dynamique globale de la phase porteuse, en raison de leur faible taille ($\tau_r \to 0$) [84]. Ainsi, leur capture repose principalement sur la diffusion moléculaire, un processus par lequel les polluants migrent de la phase contaminée vers une phase plus pure à travers une interface, tel que schématisé en figure 1.5. Ce transport diffusif engendre la formation d'une couche limite de concentration, dont l'épaisseur augmente avec le temps de contact.

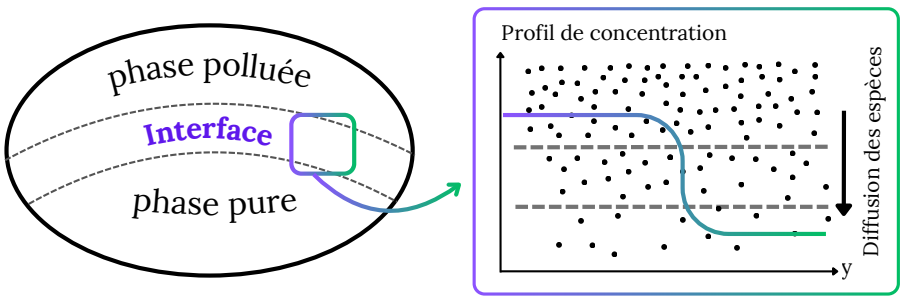



FIGURE 1.5 – Illustration du mécanisme de capture de polluant par diffusion moléculaire

Le travail de recherche mené dans cette thèse porte sur l'extraction des contaminants gazeux ou des particules nanométriques. Le mécanisme de diffusion moléculaire est donc le principal processus de dépollution auquel nous nous intéressons.

## 1.4 Structure du manuscrit

**Chapitre 1 : Introduction et contexte général.** Cette première pierre du présent travail introduit la problématique du transfert de masse aux interfaces des écoulements diphasiques à bulles et à gouttes. Elle met en évidence l'intérêt que suscitent de telles configurations d'écoulements diphasiques pour le transfert interfacial, dans de nombreux secteurs d'application, tant environnementaux qu'industriels. Qu'il s'agisse de nuages de bulles ou de gouttelettes de sprays dans des pulvérisateurs, diverses applications reposant sur le transfert de masse dans ces configurations ont été présentés. Notamment, les procédés d'absorption des composants gazeux dans un liquide à travers un système d'écoulement à bulles (oxygénation, Hydrogénation), dans les colonnes à bulle, les cuves de bullage, les bassins d'aération, etc. Ainsi que d'autres procédés incluant des sprays retrouvés dans les tours de pulvérisation liquide.

**Chapitre 2 : État de l'art sur le transfert de masse.** Ce chapitre présente une revue approfondie de l'état de l'art sur le transfert de masse, structurée en trois grandes parties. La première est consacrée aux investigations théoriques sur le transfert de masse par diffusion moléculaire dans les systèmes gaz-liquides. Elle inclut une présentation des modèles prédictifs du coefficient de transfert, des différentes théories existantes et des régimes caractéristiques associés. La seconde partie propose un panorama des principales études expérimentales réalisées sur le sujet. Enfin, la dernière partie est dédiée aux investigations numériques, classées selon les méthodes employées pour modéliser et résoudre le problème du transfert de masse. Cette section permettra également de situer notre propre travail par rapport aux approches existantes dans la littérature.

**Chapitre 3 : Modélisation des écoulements diphasiques avec transfert de masse.** Ce chapitre expose les équations fondamentales régissant les écoulements diphasiques à phase dispersée, notamment les équations de Navier-Stokes. Il introduit également le modèle mathématique utilisé pour décrire le transfert de masse, basé sur l'équation d'advection-diffusion des espèces. Les relations de saut pour des variables telles que la pression, les contraintes visqueuses et la concentration sont également détaillées. La dernière section du chapitre présente le formalisme mono-fluide utilisé dans ce travail pour la formulation du système d'équations.

**Chapitre 4 : Méthodes numériques pour la modélisation des transferts aux interfaces.** Ce chapitre décrit les outils numériques développés et mis en œuvre pour résoudre le modèle mathématique présenté précédemment. La première section est dédiée aux techniques de localisation d'interface. La seconde détaille le solveur numérique,

le traitement des conditions aux limites, ainsi que la discrétisation en volumes finis des équations du formalisme à 1-fluide.

**Chapitre 5 : Établissement d'un modèle à deux-champs pour le problème d'advection diffusion : Résultats et validation**. Ce chapitre est consacré à l'établissement d'un modèle à deux champs, fondé sur l'adaptation de la méthode Ghost-Fluid pour le traitement du terme de diffusion du problème étudié. Dans la seconde partie du chapitre, cette approche est combinée avec différentes stratégies de traitement du terme de transport, afin d'aborder le problème complet d'advection-diffusion. Enfin, une série de validations numériques sur des cas tests académiques en 1D, 2D et 3D est présentée. Ces cas incluent notamment la diffusion instationnaire à travers des interfaces planes et courbes, le couplage advection-diffusion autour de bulles en translation ou en rotation, ainsi que des bulles déformables, impliquant une résolution couplée avec la dynamique de l'écoulement. Une étude comparative est menée entre les approches à 1-fluide et à deux champs. L'analyse porte sur la qualité de la solution du champ de concentration et le nombre de Sherwood ($Sh$), qui quantifie le transfert de masse de manière adimensionnelle. Les résultats sont évalués et validés à travers des études de convergence vis-à-vis de solutions analytiques.

CHAPITRE 2

# État de l'art sur le transfert de masse

## Structure du chapitre


2.1 Transferts de masse dans les écoulements diphasiques à phase dispersée . . 38
2.2 Transfert de matière par diffusion moléculaire . . . . . 40
2.2.1 Modèles prédictifs du coefficient de transfert de masse . . . . . 42
2.2.1.1 Bulle ou goutte isolée . . . . . 44
2.2.1.2 Ensembles de bulles/gouttes (colonnes, réacteur) . . . . . 46
2.2.2 Théorie du transfert de masse . . . . . 47
2.2.2.1 Théorie du film (Lewis et Whitman [95]) . . . . . 48
2.2.2.2 Théorie de pénétration (Higbie [73]) . . . . . 49
2.2.2.3 Théorie de renouvellement à l'interface (Danckwerts [32]) 51
2.2.2.4 Théorie de la divergence de surface (McCready, Vassiliadou et Hanratty [110]) . . . . . 52
2.2.3 Quels sont les différents modes de transferts de masse ? . . . . . 53
2.3 Investigations expérimentales . . . . . 54
2.3.1 Mesure des champs de concentration autour des bulles . . . . . 55
2.3.1.1 Fluorescence Induite par Laser (LIF) . . . . . 55
2.3.1.2 Interférence par Holographie Laser (LHI) . . . . . 56
2.3.2 Mesure des variations de volume, surface ou pression des bulles . . . 56
2.3.2.1 Mesure de la différence de pression . . . . . 57
2.3.2.2 Mesure de variation de volume et de taille de bulles . . . . 57
2.4 Investigations numériques . . . . . 59
2.4.1 Résolution de transfert de masse dans une unique phase . . . . . 60
2.4.2 Méthode de Lattice Boltzmann pour le transfert de masse . . . . . 61
2.4.3 Modèle sous-maille pour le transfert de masse . . . . . 62
2.4.4 Modèle continu : à 1-fluide pour le transfert de masse . . . . . 63
2.4.5 Modèle discontinu : à deux champs pour le transfert de masse . . . 64
2.5 Apport du présent travail . . . . . 65

## 2.1 Transferts de masse dans les écoulements diphasiques à phase dispersée

Le transfert de masse entre deux phases immiscibles est un phénomène fondamental omniprésent dans de nombreux procédés industriels et contextes environnementaux. Il intervient notamment dans les opérations unitaires du génie chimique, comme l'absorption, la désorption ou l'extraction, ainsi que dans l'analyse des processus naturels tels que les échanges atmosphère-océan. Une compréhension fine de ce mécanisme est alors essentielle pour l'optimisation des performances des procédés, d'une part, ainsi que pour l'efficacité de la conception des équipements, tels que les échangeurs de matière gaz-liquide, d'autre part. L'efficacité du transfert de masse dépend principalement de deux facteurs clés : le premier est la solubilité du gaz dans le fluide, qui conditionne son absorption et détermine l'équilibre thermodynamique à l'interface. Le second est la capacité de ce fluide à transporter l'espèce dissoute au sein du milieu, sous l'effet combiné de la diffusion moléculaire et de la convection. Cette efficacité est généralement quantifiée à l'aide du coefficient de transfert de masse $k_\ell$ qui exprime la rapidité avec laquelle le soluté traverse l'interface pour être absorbé. Plus la valeur de ce coefficient est élevée, plus le transfert de masse est rapide et donc efficace. Elle est également évaluée avec le nombre de Sherwood ($Sh$), grandeur adimensionnelle qui compare le transfert convectif au transfert diffusif.

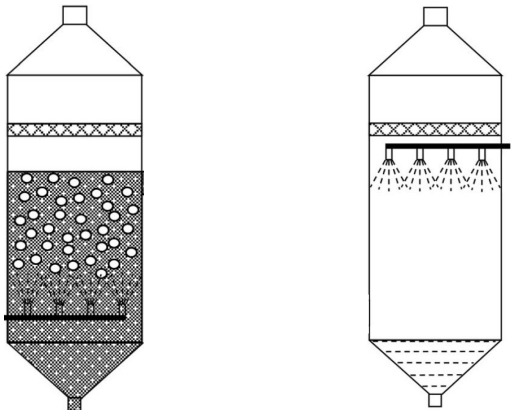
En raison de leur importance stratégique dans de multiples secteurs et des enjeux associés, les transferts de masse dans les écoulements diphasiques ont suscité de nombreuses études théoriques, expérimentales et numériques qui témoignent de leurs complexités. Ces trois axes d'investigation seront explorés dans la suite du chapitre.

### Contacteurs gaz-liquide pour le transfert de masse

De nombreuses installations industrielles utilisent des procédés d'absorption/désorption pour transférer des composants gazeux vers une phase liquide ou gazeuse à travers les interfaces fluides. L'absorption gaz-liquide est principalement pilotée par la solubilité de l'espèce dans la phase liquide. Elle peut également être favorisée par la présence d'une réaction chimique entre l'espèce dissoute et l'un des constituants du solvant ayant pour effet l'augmentation de la quantité de matière transférée. La désorption liquide-gaz, aussi appelée "stripping", quant à elle consiste à transférer une espèce dissoute dans un liquide vers un milieu gazeux. Dans ce contexte, différents types de contacteurs gaz-liquide sont mis en œuvre pour favoriser le transfert du gaz entre les deux phases. Parmi ces systèmes, on peut citer :

— **Les colonnes à bulles :** schématisées en figure 2.1a, ce sont des échangeurs de matière gaz-liquide dans lesquels la phase gazeuse est dispersée sous forme de fines bulles dans une phase liquide continue. Les bulles générées montent en ascension libre au sein du liquide qui peut être au repos ou en mouvement co-courant ou contre-courant. De telles installations sont efficaces pour les échanges gaz-liquide lents rencontrés dans les composants peu solubles tels que l'oxygène et l'azote. Ces installations sont aussi efficaces pour les transferts réactifs. La forme de la colonne à bulles peut être très adaptable selon l'application visée.

— **Les colonnes à pulvérisation :** aussi dites tours de pulvérisation, illustrées en figure 2.1b, consistent à asperger un liquide, généralement de l'eau, du haut de la colonne par des pulvérisateurs. Ainsi, un spray de petites gouttelettes est généré et celui-ci s'écoule de façon gravitaire à contre-courant du flux de gaz ascendant (lequel est injecté du bas de la colonne). Ce type de dispositif est fréquemment efficace pour les procédés de lavage des gaz.



(a) (b)

FIGURE 2.1 – Illustrations des échangeurs de matière gaz-liquide : (a) colonne à bulles, (b) colonne à pulvérisations [173].

De manière générale, les dispositifs d'écoulement à bulles sont largement utilisés dans des opérations telles que l'oxygénation [1], l'ozonation [2], ou l'hydrogénation [3] ainsi que lors de la désorption de certains composants comme le $CO_2$ ou l'ammoniac $NH_3$. Ces procédés sont généralement réalisés au sein de colonnes à bulles, de bassins de bullage ou encore de cuves agitées. D'autres procédés, tels que le lavage de gaz (par absorption dans une phase liquide), visent à éliminer des effluents gazeux indésirables tels que le dioxyde de soufre $SO_2$, le dioxyde de carbone $CO_2$ ou le sulfure d'hydrogène $H_2S$. La phase liquide peut alors être soit dispersée sous forme de gouttelettes, comme dans les tours de pulvérisation,

1. Procédé qui vise à dissoudre de l'oxygène $O_2$ dans un fluide.
2. Procédé reposant sur le transfert de $O_3$
3. Procédé de transfert d'hydrogène $H_2$

ou s'écouler sous forme de film liquide dans les colonnes à plateaux ou à garnissage [130]. L'élément clé dans tous ces procédés est la surface de contact entre les deux phases. Plus cette aire interfaciale est grande, plus le transfert de masse est efficace et donc plus le procédé considéré est performant.

## 2.2 Transfert de matière par diffusion moléculaire

Lorsque les deux phases d'un écoulement diphasique présentent des concentrations différentes d'une ou de plusieurs espèces chimiques, un transfert de masse spontané se produit à travers l'interface qui les sépare. Ce gradient de concentration constitue donc la force motrice du transfert de matière entre les deux milieux. En effet, les espèces chimiques migrent naturellement de la phase à plus haute concentration vers celle à plus faible concentration, tendant ainsi vers un équilibre thermodynamique. Le flux de matière échangé entre les phases s'effectue principalement par diffusion moléculaire au sein d'une zone, très fine adjacente à l'interface, appelée *couche limite massique* ou encore *couche limite de diffusion*. Selon les conditions hydrodynamiques et les propriétés physico-chimiques du système, l'épaisseur de cette couche varie du micromètre à quelques dizaines de micromètres. Cette couche limite constitue la région où se localise la résistance au transfert de masse. De ce fait, la compréhension et la résolution fine de cette dernière est cruciale pour modéliser et prédire avec précision les échanges de matière.

Le mécanisme de transfert d'espèces par diffusion moléculaire à travers la couche limite massique est mathématiquement décrit par la loi de Fick [51] qui est une analogie avec la loi de Fourier pour la conduction thermique. Elle décrit le mouvement spontané des espèces chimiques sous l'effet d'un gradient de concentration en établissant une relation linéaire entre le flux de diffusion et ce gradient.

$$\mathbf{J} = -D\nabla C \tag{2.1}$$

- $\mathbf{J}$ représente le flux de masse par unité de surface $[\mathrm{mol} \cdot \mathrm{s}^{-1} \cdot \mathrm{m}^{-2}]$ et traduit la quantité de matière échangée entre les phases en traversant une surface par unité de temps.
- D est le coefficient de diffusivité $[\mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{s}^{-1}]$ qui dépend du milieu et de la nature de l'espèce.
- $\nabla C$ est le gradient de concentration $[\mathrm{mol} \cdot \mathrm{m}^{-4}]$ qui traduit la variation spatiale de la concentration.

Pour modéliser la variation temporelle de la concentration, comme la pénétration d'un gaz dans un liquide, une seconde loi de Fick dite transitoire est introduite. Elle est dérivée

de la première loi de Fick [51] et de la conservation de la masse :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -D\nabla^2 C \tag{2.2}$$

Dans les systèmes diphasiques impliquant le transfert de masse, la loi de Fick s'applique dans chacune des phases séparément mais elle nécessite un raccord au niveau de l'interface séparant les deux milieux. Ce couplage est régi par deux relations fondamentales : une continuité du flux de diffusion qui traduit la conservation de la matière à travers l'interface $\Gamma$

$$\mathbf{J}_{\mathbf{A}}^{\mathbf{\Gamma}} = -D_g \left.\frac{\partial C_{A,G}}{\partial n}\right|_{\Gamma} = -D_\ell \left.\frac{\partial C_{A,L}}{\partial n}\right|_{\Gamma} \tag{2.3}$$

ainsi qu'un saut de concentration imposé par l'équilibre thermodynamique

$$C_{A,g}^{\Gamma} = \Lambda_{g,\ell}\, C_{A,\ell}^{\Gamma} \tag{2.4}$$

où

- $C_{A,g}^{\Gamma}$ représente la concentration en espèce $A$, au niveau de l'interface côté gaz $[\mathrm{mol}\cdot\mathrm{m}^{-3}]$,
- $C_{A,\ell}^{\Gamma}$ représente la concentration en espèce $A$, au niveau de l'interface côté liquide $[\mathrm{mol}\cdot\mathrm{m}^{-3}]$,
- $\Lambda_{g,\ell}$ est la constante de partition ou de solubilité $[-]$.

Cette discontinuité de concentration à l'interface (2.4) découle de la différence de solubilité de l'espèce considérée $A$ dans chaque phase. La solubilité d'un gaz dépend généralement de la température, de la pression ainsi que des propriétés intrinsèques du gaz et du solvant. Elle est pilotée par une grandeur adimensionnelle $\Lambda_{g,\ell}$, dite constante de solubilité ou constante de partition qui relie les concentrations interfaciales de l'espèce dissoute dans chacune des deux phases.

Dans le cas particulier des systèmes gaz-liquide, cette partition est exprimée par la loi de Henry ($\Lambda_{g,\ell} = \mathrm{He}$), qui reflète la proportionnalité, à l'équilibre, entre la concentration de la substance $A$ dans la phase liquide et la phase gazeuse. Elle peut être définie sous différentes formes, soit comme le rapport $C_\ell/C_g$ pour exprimer la solubilité, soit comme son inverse $C_g/C_\ell$ pour traduire la volatilité.

$$C_{A,g}^{\Gamma} = \mathrm{He}\, C_{A,\ell}^{\Gamma} \tag{2.5}$$

La loi de Henry est couramment utilisée dans le processus d'absorption des composants gazeux dans des liquides et permet de prédire efficacement l'équilibre gaz-liquide. Différentes expressions de la constante de Henry sont possibles en fonction de ses unités,

comme indiqué dans le tableau 2.1 ci-dessous.

TABLE 2.1 – Constantes de la loi de Henry et leurs conversions. D'après SANDER [134]

| **Symbole** | **Définition** | **Unité SI** | **Conversion[a] depuis** $H^{cp}$ |
|---|---|---|---|
| $H^{cp}$ | $C_\ell/p$ | mol $m^{-3}$ $Pa^{-1}$ | – |
| $H^{pc}$ | $p/C_\ell$ | Pa $m^3$ $mol^{-1}$ | $1/H^{cp}$ |
| $H^{px}$ | $p/x$ | Pa | $(\rho_{H_2O}/M_{H_2O})/H^{cp}$ |
| He | $C_g/C_\ell$ | – | $1/(H^{cp} \cdot RT)$ |

$p$, $C_\ell$, $C_g$, $x$, $\rho_{H_2O}$ et $M_{H_2O}$ désignent respectivement :
la pression partielle du gaz, les concentrations dans les phases liquide et gaz,
la fraction molaire de la phase aqueuse (adimensionnelle),
la densité et la masse molaire de l'eau.

Cette diversité d'expressions de la constante de la loi de Henry résulte de la multiplicité des grandeurs pouvant être utilisées pour décrire la composition des deux phases. Pour la phase liquide, les choix typiques sont la concentration molaire ($C_\ell$), la molalité ($M$) et le rapport de mélange molaire ($x$). Pour la phase gazeuse, la concentration molaire ($C_g$) et la pression partielle ($p$) sont souvent utilisées [134]. Le tableau suivant 2.2 résume les constantes d'Henry pour différents gaz dans de l'eau à 25 °C.

TABLE 2.2 – Constantes de la loi de Henry pour des gaz dissous dans l'eau à 25 °C. D'après SANDER [133]

| **Équation** | $H^{pc} = \dfrac{p}{C_\ell}$ | $H^{cp} = \dfrac{C_\ell}{p}$ | $H^{px} = \dfrac{p}{x}$ | $\frac{1}{He} = \dfrac{C_\ell}{C_g}$ |
|---|---|---|---|---|
| **Unité** | atm l $mol^{-1}$ | mol $l^{-1}$ $atm^{-1}$ | atm | adimensionnel |
| Oxygène ($O_2$) | 769,23 | $1{,}3 \times 10^{-3}$ | $4{,}259 \times 10^{-4}$ | $3{,}181 \times 10^{-2}$ |
| Hydrogène ($H_2$) | 1282,05 | $7{,}8 \times 10^{-4}$ | $7{,}099 \times 10^{-4}$ | $1{,}907 \times 10^{-2}$ |
| Dioxyde de carbone ($CO_2$) | 29,41 | $3{,}4 \times 10^{-2}$ | 0,163 | 0,831 |
| Azote ($N_2$) | 1639,34 | $6{,}1 \times 10^{-4}$ | $7{,}01 \times 10^{-4}$ | $1{,}492 \times 10^{-2}$ |
| Hélium (He) | 2702,7 | $3{,}7 \times 10^{-4}$ | 14,97 | $9{,}051 \times 10^{-3}$ |
| Néon (Ne) | 2222,22 | $4{,}5 \times 10^{-4}$ | 12,30 | $1{,}101 \times 10^{-2}$ |
| Argon (Ar) | 714,28 | $1{,}4 \times 10^{-3}$ | $3{,}955 \times 10^{-4}$ | $3{,}453 \times 10^{-2}$ |
| Monoxyde de carbone (CO) | 1052,63 | $9{,}5 \times 10^{-4}$ | $5{,}828 \times 10^{-4}$ | $2{,}324 \times 10^{-2}$ |

Pour davantage de valeurs, le lecteur pourra se référer aux travaux récents de SANDER et al. [135] et SANDER [134] dans lesquels sont répertoriées de nombreuses constantes de Henry pour diverses espèces chimiques.

### 2.2.1 Modèles prédictifs du coefficient de transfert de masse

Dans le cadre de la simulation numérique des écoulements diphasiques impliquant le transfert de masse, en plus de résoudre la dynamique de l'écoulement régie par les équations

de Navier-Stokes, on résout également l'équation d'advection-diffusion de concentration pour suivre le transfert de matière dans le domaine. Cet ensemble d'équations couplées permet de modéliser simultanément le comportement hydrodynamique de l'écoulement, le transfert de masse, ainsi que les interactions interfaciales. La physique complexe de ces phénomènes peut être caractérisée par des nombres adimensionnels bien connus en mécanique des fluides. Parmi les nombres adimensionnels les plus importants pour décrire l'hydrodynamique de l'écoulement, nous citons :

**Nombre de Reynolds** ($Re$) : il compare les forces d'inertie aux forces visqueuses et permet de déterminer les régimes d'écoulement : laminaire, induit par une dominance de forces visqueuses, ou turbulent, résultant d'une dominance de forces inertielles.

$$Re = \frac{\rho U d_0}{\mu} \tag{2.6}$$

**Nombre de Weber** ($We$) : il représente le rapport entre les forces inertielles et les forces de tension superficielle. Il constitue un paramètre critique pour prédire la déformation des interfaces.

$$We = \frac{\rho U^2 d_0}{\sigma} \tag{2.7}$$

D'autre part, pour décrire le transfert de masse, les nombres adimensionnels fondamentaux sont les suivants :

**Nombre de Schmidt** ($Sc$) : il donne le rapport entre la diffusion de la quantité de mouvement et la diffusion de la masse. Il influe sur l'épaisseur des couches limites : un $Sc \gg 1$ indique que la couche limite massique est plus mince que la couche limite visqueuse.

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_\ell} \tag{2.8}$$

**Nombre de Peclet de masse** ($Pe_M$) : il caractérise la compétition entre la convection et la diffusion moléculaire, permettant d'identifier si le transport d'une espèce est principalement dominé par le mouvement du fluide ou par diffusion.

$$Pe_M = \frac{U d_0}{D_\ell} \tag{2.9}$$

**Nombre de Sherwood** ($Sh$) : il quantifie le taux de transfert de masse convectif par rapport à la diffusivité de masse à l'interface. Il constitue une mesure adimensionnelle de l'intensité du flux de matière, permettant d'évaluer l'efficacité du transfert de matière

entre deux phases.

$$Sh = \frac{K_\ell}{D_\ell / d_0} \tag{2.10}$$

où $K_\ell$ désigne le coefficient de transfert de masse dans la phase liquide, défini à l'équation (2.37). Ce nombre de Sherwood constitue un paramètre fondamental dans l'étude des phénomènes de transfert de masse. Il a ainsi été au cœur de nombreuses investigations théoriques visant à mieux comprendre les mécanismes de transfert aux interfaces. Ci-dessous sont résumées les principales corrélations analytiques, empiriques et semi-empiriques communément utilisées dans les procédés de transfert de masse dans les écoulements diphasiques à bulles ou à gouttes. Ces corrélations dépendent globalement du régime d'écoulement, de la configuration géométrique considérée et des conditions aux limites. Elles sont exprimées en fonction des propriétés physiques des deux phases, gaz et liquide, ou par des nombres adimensionnels caractéristiques.

#### 2.2.1.1 Bulle ou goutte isolée

Pour les bulles ou les gouttes en mouvement, une forme générale pour le nombre de Sherwood est donnée sous la forme :

$$Sh = A + B \times Re^{\alpha} Sc^{\gamma} \tag{2.11}$$

où la première constante, souvent égale à $A = 2$, découle de la valeur asymptotique du nombre de Sherwood observée dans le cas d'une sphère en régime purement diffusif $Sh = 2$. Les constantes $B, \alpha$ et $\gamma$ varient en fonction du régime d'écoulement, de la sphéricité ou de la déformabilité de la bulle/goutte et du degré de contamination de l'interface [4]. Dans ce qui suit, une revue des différentes expressions du nombre de Sherwood proposées dans la littérature est présentée.

La corrélation semi-empirique de Frössling [55] pour des écoulements laminaires ($Re \sim 1 - 10$) impliquant des bulles sphériques. Cette corrélation est valable pour les régimes de transfert de masse externes, pilotés par la résistance dans la phase liquide continue :

$$Sh = 2 + 0.552 Re^{1/2} Sc^{1/3} \tag{2.12}$$

La corrélation de Ranz et Marshall [126] est basée sur une étude expérimentale de gouttes en chute libre et qui est valable pour des écoulements laminaires ($Re < 200$) ainsi que pour une gamme étendue de nombres de Schmidt ($0.6 < Sc < 2500$). Elle est

4. Selon la présence ou non de surfactants, la surface est considérée comme propre ou rigide (recouverte de surfactants)

applicable aux régimes de transfert de masse externes dans une sphère isolée.

$$Sh = 2 + 0.6Re^{1/2}Sc^{1/3} \tag{2.13}$$

Pour les systèmes contaminés en régime laminaire, Hughmark [75] a proposé la corrélation suivante :

$$Sh = 2 + 0.95Re^{1/2}Sc^{1/3} \tag{2.14}$$

Clift, Grace et Weber [30] ont proposé plusieurs corrélations pour le nombre de Sherwood selon le domaine de validité. Pour les écoulements à faible nombre de Reynolds, celle-ci est donnée par :

$$Sh = 1 + \left[1 + 0.564Pe^{2/3}\right]^{3/4} \tag{2.15}$$

Pour les bulles déformables en régime inertiel à fort nombre de Reynolds (jusqu'à $Re = 10^4$), la corrélation est donnée par :

$$Sh = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\sqrt{Pe}\left[1 - \frac{2.89}{\sqrt{Re}}\right]^{1/2} \tag{2.16}$$

La même équipe a fourni une corrélation applicable aux surfaces rigides polluées par la présence de tensioactifs [72].

$$Sh = 2 + 0.3Re^{1/2}Sc^{1/3} \tag{2.17}$$

Brauer [14] ont établi une corrélation qui prend en considération les effets de la déformabilité et de l'agitation de l'écoulement turbulent, généralement adaptée pour les bulles oscillantes de diamètre équivalent $d_0$, tel que ($3$ mm $< d_0 <$ $10$ mm)

$$Sh = 2 + 0.015Re^{0.89}Sc^{0.7} \tag{2.18}$$

Levich [94] a suggéré une corrélation pour le nombre de Sherwood pour les bulles/gouttes mobiles en régime purement convectif (haut $Pe$) avec des interfaces propres, sans présence de surfactants

$$Sh = \frac{2}{\sqrt{\pi}}.Re^{1/2}.Sc^{1/2} \tag{2.19}$$

Les travaux de Lochiel et Calderbank [103] proposent différentes corrélations adaptées à des domaines de validité variés. Pour un écoulement rampant ($Re \ll 1$),

$$Sh = 0.65\sqrt{Pe}\left[\frac{\mu_\ell}{\mu_g + \mu_\ell}\right]^{1/2} \tag{2.20}$$

Pour les sphères dans un écoulement à $Re$ élevé,

$$Sh = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\sqrt{Pe}\left[1 - \frac{2 + 3\frac{\mu_g}{\mu_\ell}}{1 + (\frac{\rho_g \mu_g}{\rho_\ell \mu_\ell})}\frac{1.45}{\sqrt{Re}}\right]^{1/2} \tag{2.21}$$

Pour le cas de bulles dispersées dans une phase liquide continue, le rapport $\frac{\rho_g \mu_g}{\rho_\ell \mu_\ell}$ est négligeable, l'expression du nombre de Sherwood se simplifie, telle que :

$$Sh = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\sqrt{Pe}\left[1 - \frac{2.96}{Re^{1/2}}\right]^{1/2} \tag{2.22}$$

Pour les régimes d'écoulement à très forts nombres de Reynolds et de Schmidt, et en considérant une forme sphérique en régime établi :

$$Sh = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\sqrt{Pe} \tag{2.23}$$

Takemura et Yabe [151] ont proposé une corrélation pour les écoulements caractérisés par des nombres de Reynolds tels que $Re < 100$ et des nombres de Péclet tels que $Pe > 1$. Elle est donnée par :

$$Sh = \frac{2}{\sqrt{\pi}}(2.5 + \sqrt{Pe})\left[1 - \frac{2}{3}\frac{1}{(1 + 0.09Re^{2/3})^{3/4}}\right]^{1/2} \tag{2.24}$$

Pour les bulles sphériques oscillantes, Montes, Galan et Cerro [112] suggèrent la corrélation suivante pour le nombre de Sherwood,

$$Sh = \frac{2}{\sqrt{\pi}}[1.1 + 0.027\sqrt{We}][Re.Sc]^{1/2} \tag{2.25}$$

Dans le cas de gouttes liquides, les corrélations sont souvent les mêmes que celles des bulles, mais il faut parfois considérer le rapport de viscosité et de densité entre les phases.

#### 2.2.1.2 Ensembles de bulles/gouttes (colonnes, réacteur)

Pour traiter des conditions réalistes dans des colonnes à bulles en écoulement turbulent hétérogène Wanek et Duduković [166] ont proposé la corrélation suivante pour le nombre de Sherwood :

$$Sh = 0.5Re^{0.6}Sc^{0.33} \tag{2.26}$$

Dans le cas du lit fluidisé à bulles, Deckwer [36] [19] propose :

$$Sh = 1.2Re^{0.5}Sc^{0.33} \tag{2.27}$$

La corrélation de Letzel et al. [93], valable pour les colonnes à bulles en régime turbulent homogène, est donnée par :

$$Sh = 2 + 0.84 Re^{0.57} Sc^{1/3} \tag{2.28}$$

La corrélation de Kintner, Curtis et Toor [90], [126] est similaire à celle de Ranz et Marshall [126], et est adaptée pour des colonnes à gouttes :

$$Sh = 2 + 0.6 Re^{1/2} Sc^{1/3} \tag{2.29}$$

Pour les réacteurs agités gaz-liquide, la corrélation de Skelland et Moeti [141] donne le nombre de Sherwood dans la phase liquide,

$$Sh_\ell = 2 + 0.47 . Re^{0.62} . Sc^{0.36} \tag{2.30}$$

et Linek, Vacek et Benes [101] donne la corrélation du nombre de Sherwood dans le gaz,

$$Sh_G = 0.35 Re^{0.7} Sc^{0.33} \tag{2.31}$$

### 2.2.2 Théorie du transfert de masse

Le paramètre clé dans l'évaluation du nombre de Sherwood est le coefficient de transfert de masse, noté $k_\ell$ pour la phase liquide et $k_g$ pour la phase gazeuse. Ce coefficient est défini à partir de la relation du flux massique qui exprime la quantité de matière transférée par unité de surface et de temps à travers l'interface entre les deux phases,

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= -D_\ell \nabla C_\ell = k_\ell [C_\ell^\Gamma - C_\ell] \\ &= -D_g \nabla C_g = k_g [C_g - C_g^\Gamma] \end{aligned} \tag{2.32}$$

il vient,

$$k_\ell = \frac{-D_\ell \nabla C_\ell}{[C_\ell^\Gamma - C_\ell]} \quad ; \quad k_g = \frac{-D_g \nabla C_g}{[C_g - C_g^\Gamma]} \tag{2.33}$$

- $k_\ell, k_g$ : représentent les coefficients de transfert de masse, respectivement côté liquide et côté gaz $[\mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}]$.
- $C_\ell^\Gamma, C_g^\Gamma$ : représente la concentration de l'interface respectivement côté liquide et côté gaz $[\mathrm{mol} \cdot \mathrm{m}^{-3}]$.
- $C_\ell, C_g$ : représente la concentration loin de l'interface dans le liquide et dans le gaz, respectivement $[\mathrm{mol} \cdot \mathrm{m}^{-3}]$.

Le coefficient de transfert de masse peut également être exprimé en fonction du flux de diffusion volumique total, tel que :

$$\mathbf{\Phi} = A_\Gamma \mathbf{J} = A_\Gamma k_\ell [C_\ell^\Gamma - C_\ell] \quad = A_\Gamma k_g [C_g - C_g^\Gamma] \tag{2.34}$$

— $\mathbf{\Phi}$ : se réfère au flux de masse volumique total par unité de temps [$\mathrm{mol \cdot s^{-1}}$]
— $A_\Gamma$ : se réfère à l'aire interfaciale [$\mathrm{m^2}$]

Ces deux dernières relations montrent que le taux de transfert de masse est fondamentalement conditionné par deux paramètres : l'aire interfaciale $A_\Gamma$, qui est la surface "efficace" à travers laquelle s'opère le transfert de matière et le coefficient de transfert $k_\ell$. Ce dernier dépend des propriétés physico-chimiques des deux phases ainsi que de l'agitation turbulente au voisinage des interfaces.

Plusieurs théories ont été mises en place pour modéliser les échanges de matière entre deux phases et quantifier le taux de transfert de masse via le calcul du coefficient de transfert $k_\ell$. Dans la partie qui suit, une description de ces principales théories est effectuée.

#### 2.2.2.1 Théorie du film (Lewis et Whitman [95])

Initialement proposée par Lewis et Whitman [95], la théorie du film est l'une des principales approches de modélisation des échanges de matière entre deux phases. L'idée fondatrice de ce modèle s'appuie sur la migration de l'espèce $A$ depuis une phase contaminée vers une phase pure sous l'effet du gradient de concentration entre les deux milieux. Ce transfert de masse s'opère à travers une fine couche de diffusion, d'épaisseur $\delta$, qui se développe au voisinage de l'interface du côté liquide, appelée *film liquide*. Cette dernière est caractérisée par la présence d'une résistance au transfert de matière, tandis qu'une concentration uniforme est supposée de l'autre côté de l'interface, traduisant une résistance négligeable côté gaz.

En généralisant cette approche, la théorie du double film (illustrée en figure 2.2) considère que deux fines couches de diffusion, d'épaisseurs $\delta_g$ et $\delta_\ell$, se développent en série de part et d'autre de l'interface. Celles-ci représentent la présence d'une résistance au transfert dans chacune des phases. Cette théorie considère que les deux paramètres influant sur le taux de transfert sont l'épaisseur de ces couches de diffusion et la diffusivité dans les phases. Les coefficients de transfert de la masse sont ainsi donnés par :

$$k_\ell = \frac{D_\ell}{\delta_\ell} \quad ; \quad k_g = \frac{D_g}{\delta_g} \tag{2.35}$$

$$\begin{aligned} \varphi &= -D_g \nabla C_g = k_g [C_g^\Gamma - C_g] \\ &= -D_\ell \nabla C_\ell = k_\ell [C_\ell - C_\ell^\Gamma] \end{aligned} \tag{2.36}$$

À l'équilibre, les coefficients globaux de transfert de masse dans le liquide et dans le gaz, respectivement $K_\ell$ et $K_g$, sont décrits en combinant la relation de saut (2.4) et l'équation (2.36) comme suit,

$$\begin{aligned} \frac{1}{K_\ell} &= \frac{1}{k_\ell} + \frac{1}{\mathrm{He}\ k_g} \quad &\Rightarrow \quad K_\ell &= \frac{k_\ell k_g}{\frac{k_\ell}{\mathrm{He}} + k_g} \\ \frac{1}{K_g} &= \frac{1}{k_g} + \frac{\mathrm{He}}{k_\ell} \quad &\Rightarrow \quad K_g &= \frac{k_\ell k_g}{k_\ell + \mathrm{He}\ k_g} \end{aligned} \tag{2.37}$$

Ces expressions traduisent exactement la conservation de la matière et la thermodynamique d'équilibre à l'interface.

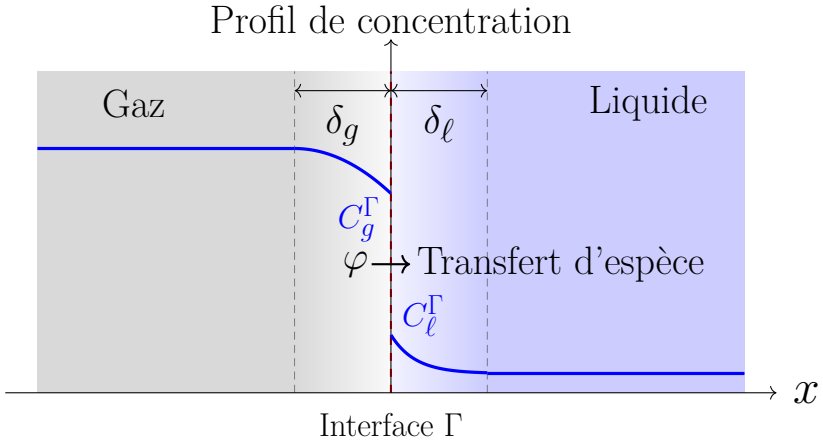



FIGURE 2.2 – Représentation du modèle du double film

En raison de sa simplicité, ce modèle a largement été utilisé dans les études de transfert de masse. En revanche, malgré son succès, il a été remis en question suite à des investigations expérimentales qui observent plutôt une dépendance de $k_\ell$ en $\propto D_\ell^{1/2}$ dans le cas d'une interface pure.

#### 2.2.2.2 Théorie de pénétration (Higbie [73])

À la différence de la théorie du double film, qui décrit un transfert de masse contrôlé par un gradient de concentration entre deux fluides en contact permanent, le modèle de pénétration considère un transfert instationnaire entre les deux phases. Dans ce modèle, le transfert s'opère par contact périodique d'un groupement d'éléments fluides avec l'interface, pendant un temps de séjour limité. L'idée de cette théorie proposée par HIGBIE [73] repose sur le renouvellement permanent du liquide au niveau de l'interface par un liquide pur lointain, comme illustré sur la figure 2.3. Le temps de contact avec l'interface est le même pour tous les paquets de fluides renouvelés et dépend principalement de l'agitation

du milieu. Ainsi, le coefficient de transfert de masse dans la phase liquide est exprimé par :

$$k_\ell = \sqrt{\frac{D_\ell}{\pi\tau}} \tag{2.38}$$

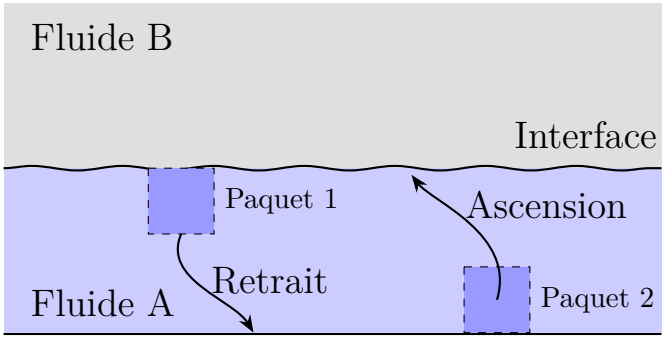



FIGURE 2.3 – Représentation du modèle de pénétration de Higbie

Ce modèle est particulièrement adéquat pour les problèmes de diffusion moléculaire instationnaire, pour lesquels le temps de contact est trop court pour atteindre le régime permanent de transfert. La principale limitation de ce modèle réside dans la difficulté de la prédiction de l'échelle de temps $\tau$. Pour cela, des recherches ultérieures ont été consacrées à l'estimation de ce temps de séjour. Dans ce qui suit, certaines de ces études sont présentées :

— Le modèle des grands tourbillons (LEM) de FORTESCUE et PEARSON [53] stipule que les grandes structures turbulentes, de l'échelle intégrale $l$, contrôlent le renouvellement de l'interface. Le temps de contact est alors donné par :

$$\tau \propto \left[\frac{l^2}{\epsilon}\right]^{\frac{1}{3}} \tag{2.39}$$

où $\epsilon = \mathbf{u}_{\mathbf{rms}}^{\mathbf{3}}/l$ est la dissipation d'énergie turbulente et $\mathbf{u}_{\mathbf{rms}}$ est la vitesse fluctuante caractéristique (RMS) de la turbulence.

— Modèle des petits tourbillons (SEM) proposé par BANERJEE, SCOTT et RHODES [6], qui suppose que les petites structures à l'échelle de Kolmogorov dominent le transfert. Le temps de contact est donné par :

$$\tau \propto \left[\frac{\nu}{\epsilon}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{2.40}$$

où $\nu$ est la viscosité cinématique du fluide.

THEOFANOUS, HOUZE et BRUMFIELD [157] ont proposé un modèle qui uni les deux

modèles LEM et SEM précédents. En effet, ils ont montré que le LEM prédit correctement le coefficient de transfert de masse dans les écoulements à faibles nombres de Reynolds $Re$ où les grands tourbillons dominent. Le SEM, en revanche, est plutôt adapté aux régimes hautement turbulents, où les petits tourbillons dominent le processus de renouvellement d'interface. Pour les régimes transitoires, une combinaison des deux modèles est nécessaire.

En s'appuyant sur une simulation numérique du transfert de masse dans des bulles en turbulence homogène et isotrope, Farsoiya, Popinet et Deike [46] ont proposé un modèle pour l'échelle de temps $\tau$. Celui-ci est basé sur l'hypothèse que les grandes échelles de l'écoulement interagissent avec les bulles de diamètre $d_0$ présentes dans l'écoulement, impactant ainsi l'échelle de temps caractéristique. Le modèle s'appuie sur la théorie de pénétration de Higbie et propose :

$$\tau = \frac{d_0}{\sqrt{3}\mathbf{u_{rms}}} \tag{2.41}$$

#### 2.2.2.3 Théorie de renouvellement à l'interface (Danckwerts [32])

Le modèle de renouvellement d'interface a été proposé par Danckwerts [32] comme une extension du modèle de pénétration de Higbie [73] et repose sur l'hypothèse d'un temps de contact constant. Ce modèle offre une représentation plus réaliste des phénomènes de transfert de masse dans des systèmes où l'agitation turbulente renouvelle en permanence l'interface entre les phases. Contrairement au modèle de Higbie, ce modèle introduit une fréquence aléatoire de renouvellement des paquets de fluide. Cette fréquence est gouvernée par une distribution statistique, généralement de type exponentielle ou normale, liée à l'intensité de l'agitation turbulente. Ainsi, le temps de contact des éléments fluides avec l'interface devient une variable aléatoire. Le paramètre central de ce modèle est la fréquence de renouvellement de l'interface, notée $f$ (en $s^{-1}$), qui contrôle la dynamique du transfert de masse à l'interface.

Comme pour la théorie de pénétration, le transfert diffusif suit la loi de Fick en régime transitoire, pour lequel le coefficient de transfert de masse est donné par :

$$k_\ell = \sqrt{D_\ell \times f} \tag{2.42}$$

En revanche, ce modèle de Danckwerts [32] ne donne pas d'information précise pour calculer la fréquence de renouvellement des structures fluides avec l'interface.

#### 2.2.2.4 Théorie de la divergence de surface (McCready, Vassiliadou et Hanratty [110])

Ce modèle repose sur la compréhension de la relation entre l'interaction du champ de vitesse pour le gaz et le liquide ainsi que le contrôle du taux de transfert de masse. Proposée par McCready, Vassiliadou et Hanratty [110], cette approche s'appuie sur l'équation d'advection-diffusion de la concentration. Elle met particulièrement en évidence le rôle prépondérant des mouvements normaux à l'interface dans le renouvellement local du fluide et, par conséquent, dans l'efficacité du transfert de masse. En effet, cette théorie distingue la contribution normale et tangentielle du champ de vitesse en proche interface. Pour des nombres de Schmidt élevés $Sc$ (se traduisant par une couche limite massique d'autant plus fine), la composante tangentielle devient négligeable et permet de simplifier l'équation de bilan de concentration :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\mathbf{v}\frac{\partial C}{\partial y} + D\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \tag{2.43}$$

où $y$ est la coordonnée normale à l'interface. Le champ de vitesse $\mathbf{v}$ est approché par un développement de Taylor du premier ordre,

$$\mathbf{v}(y) = \mathbf{v_0} + y\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} \tag{2.44}$$

En se plaçant dans le repère mobile lié à l'interface, on a $\mathbf{v_0} = \mathbf{0}$. De plus, en supposant un écoulement incompressible, on obtient :

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} = -\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial z}\right) = \beta \tag{2.45}$$

où $\mathbf{u}$ et $\mathbf{w}$ sont les vitesses tangentielles à l'interface selon $x$ et $z$. Le terme entre parenthèses correspond à la force de divergence de surface, qui est représentée par le taux d'expansion local du fluide $\beta$. En combinant ces équations, on obtient une forme simplifiée de l'équation de transport,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \beta y\frac{\partial C}{\partial y} + D\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \tag{2.46}$$

Cette approche est dite *modèle de divergence* du champ de vitesse de surface et constitue un indicateur clé du renouvellement interfacial, qui donne une mesure de l'expansion locale du fluide. Plus la divergence est élevée, plus le fluide subit une dispersion (repoussé ou aspiré) localement à la surface. L'interface est donc mieux renouvelée, engendrant ainsi un meilleur transfert de masse.

Le transfert de masse est donc d'autant plus gouverné par les fluctuations normales à l'interface que par les grandes structures tourbillonnaires tangentielles. De ce fait, ce modèle permet de relier quantitativement la dynamique turbulente interfaciale aux flux de masse en exprimant le coefficient de transfert massique moyen, noté $k_\ell$, en fonction de deux grandeurs clés : le nombre de Schmidt, $Sc$ et la composante fluctuante de la divergence de surface, notée $\beta'$,

$$K_\ell \propto Sc^{-1/2}[\beta']^{1/2} \tag{2.47}$$

$\beta' = (\bar{\beta^2})^{1/2}$ étant le rms de divergence de surface.
L'un des avantages majeurs de cette approche réside dans le fait que la divergence de surface peut être mesurée relativement facilement, notamment en présence de faibles perturbations de l'interface. Cela contraste avec les difficultés associées aux modèles LEM (Large Eddy Model) et SEM (Small Eddy Model), pour lesquels il est souvent difficile de déterminer le temps de renouvellement $\tau$, en raison de l'absence d'une relation directe entre une grandeur mesurable expérimentalement et ces échelles temporelles.

D'autres théories sont présentées et décrites en détail dans l'ouvrage de [130], auquel nous renvoyons le lecteur pour approfondir ces aspects.

### 2.2.3 Quels sont les différents modes de transferts de masse ?

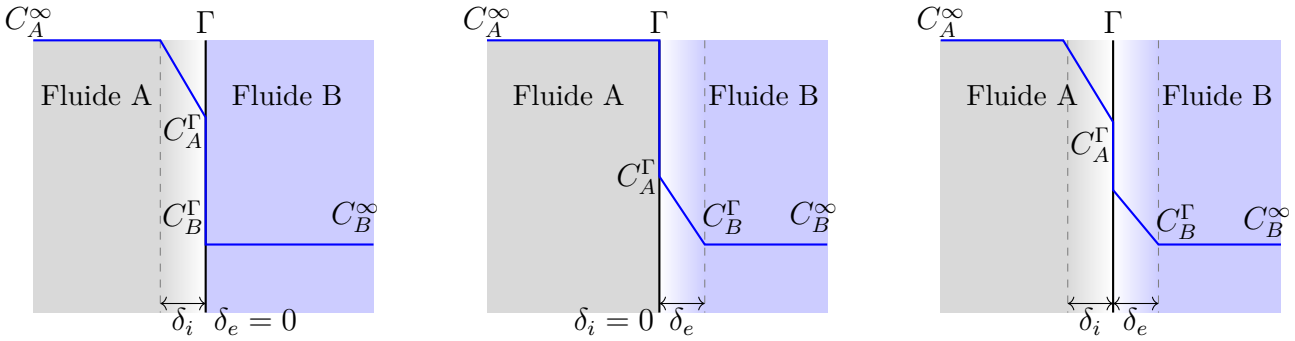
Dans les écoulements à bulles ou à gouttes, en fonction de la localisation de la résistance au transfert de masse (caractérisée par un faible coefficient de diffusion), trois régimes de transfert de masse sont à distinguer, comme illustré en figure 2.4. Cette catégorisation est mise au point grâce au critère proposé par Brauer [15], basé sur la valeur de la quantité adimensionnelle $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B}$.

— **Transfert extérieur,** $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$
Dans ce régime extérieur, le transfert de masse est contrôlé par la couche limite massique dans la phase continue extérieure (fluide B de la figure 2.4b), caractérisée par une lente diffusivité. Son épaisseur est d'autant plus grande que le temps de contact est long, se traduisant par un profil de concentration de plus en plus étalé au cours du temps. À l'intérieur de la phase dispersée (fluide A de la figure 2.4b), une distribution quasi uniforme de la concentration est assurée en tout instant grâce à la grande diffusivité $D_A \gg D_B$.

— **Transfert intérieur,** $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \ll 1$
Contrairement au cas précédent, la résistance au transfert de masse est localisée dans la phase dispersée (fluide A de la figure 2.4a). Elle est engendrée par une diffusivité plus lente que celle de la phase continue car $D_A \ll D_B$, et le profil de concentration

est constant.

— **Transfert conjugué,** $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \simeq 1$
Le transfert conjugué désigne une situation où les résistances au transfert de masse sont significatives dans les deux phases, dispersée et continue. Ce régime se rencontre lorsque les diffusivités des deux fluides sont du même ordre de grandeur, entraînant une diffusion des espèces relativement lente de part et d'autre de l'interface. Il en résulte la formation de deux couches limites massiques dont les épaisseurs augmentent avec le temps de contact. Ce régime est caractérisé par un étalement des profils de concentration dans les deux phases.




(a) Transfert interieur (b) Transfert exterieur (c) Transfert conjugué

FIGURE 2.4 – Profils de concentration suivant les différents modes de transfert de masse.

Dans le présent travail, les trois modes de transfert de masse sont étudiés afin de balayer une large gamme d'applications envisageables : dépollution des bulles par des liquides, dépollution des gouttes par des gaz et, enfin, l'extraction liquide-liquide.

## 2.3 Investigations expérimentales

Une grande variété d'investigations expérimentales a été consacrée à l'estimation du taux de transfert de masse dans les systèmes diphasiques gaz-liquide à travers l'évaluation du coefficient de transfert de masse $k_\ell$. Ce paramètre constitue un élément clé dans l'évaluation de l'efficacité des procédés mis en œuvre dans de nombreuses applications en ingénierie, telles que l'absorption, la désorption ou l'extraction. De manière générale, les investigations expérimentales reposent essentiellement sur deux approches fondamentales [7], expliquées ci-après.

### 2.3.1 Mesure des champs de concentration autour des bulles

Dans cette première approche, deux techniques optiques sont principalement utilisées : la méthode dite de Fluorescence Induite par Laser (LIF) [54] et la méthode d'Interférence par Holographie Laser (LHI) [168]. Ces deux méthodes reposent sur la mesure du champ de concentration à l'interface gaz-liquide autour des bulles/gouttes ainsi que dans leur sillage. À la différence de la technique LIF qui s'appuie sur l'intensité lumineuse émise par les espèces fluorescentes excitées dans le fluide pour déterminer les concentrations locales. La LHI exploite les déformations des franges d'interférence qui résultent des variations de l'indice de réfraction du milieu pour en déduire les gradients de concentration.

#### 2.3.1.1 Fluorescence Induite par Laser (LIF)

Cette méthode repose sur la réaction chimique entre le gaz et une substance fluorescente, permettant de visualiser le champ de concentration du soluté autour de la bulle et/ou dans son sillage. La principale limitation de cette technique de mesure réside dans le comportement de certaines fluorescences, telles que le rouge amarante et la nigrosine. Ces composés peuvent agir comme des tensioactifs et provoquer une contamination non négligeable de l'interface, entraînant ainsi une fausse mesure du taux de transfert de masse réel [30]. Cette technique a été employée par différents auteurs pour mener leurs expériences, tel que détaillé ci-après :

Roy et Duke [131] ont examiné l'effet des tensioactifs sur le transfert d'oxygène dans un écoulement à bulles dans l'eau en utilisant la méthode LIF. Leurs observations montrent que l'augmentation de la concentration de surfactants diminue les gradients de concentration au voisinage de l'interface, traduisant ainsi une réduction significative du taux de transfert. Valiorgue et al. [163] emploient une méthode améliorée de traitement des données avec la technique PLIF (Planar Laser-Induced Fluorescence) pour mesurer la concentration de $CO_2$ dissous dans l'eau, en particulier dans le sillage d'une bulle. En adoptant une variante plus avancée de la PLIF, la PLIFI (Planar Laser-Induced Fluorescence with Inhibition), les expériences de Francois et al. [54] sont réalisées sur des bulles de diamètre compris entre $0,7$ et 2mm pour six conditions d'écoulement ($1 < Re < 10^2$ et $10^2 < Sc < 10^6$). Les auteurs ont quantifié le coefficient de transfert de masse et ont établi des cartes de concentration d'oxygène dissous autour d'une bulle. Leurs résultats se situent entre les prédictions des modèles de Frössling [55] pour des bulles contaminées et de Higbie [73] pour des bulles propres. Saito et Toriu [132] ont exploré le transfert de masse autour d'une bulle oscillante de $CO_2$ en ascension dans un liquide. Ils ont combiné une méthode de mesure du changement de volume de la bulle avec la technique LIF/HPTS (Laser-Induced Fluorescence avec indicateur de pH) pour visualiser le sillage

et la distribution du $CO_2$ dissous. L'étude révèle que les fluctuations locales de vitesse autour de la bulle influencent fortement l'intensité et la distribution du transfert de masse. Elle montre également que le renouvellement rapide du liquide à proximité de l'interface, ainsi que le détachement de structures tourbillonnaires dans le sillage, améliorent significativement le taux global de transfert de masse. Kong et al. [91] ont également analysé la dissolution du $CO_2$ dans le sillage tourbillonnaire d'une bulle en ascension dans l'eau en utilisant la technique de fluorescence induite par laser à double émission (Dual-emission LIF). Les résultats obtenus montrent que le $CO_2$ dissous est initialement accumulé dans le sillage de la bulle, puis piégé dans les structures tourbillonnaires qui s'y développent, et enfin transporté loin de la bulle lorsque ces tourbillons se détachent.

#### 2.3.1.2 Interférence par Holographie Laser (LHI)

Cette technique optique repose sur l'analyse de l'interférence entre des faisceaux laser, dont les franges sont sensibles aux variations de l'indice de réfraction, elles-mêmes liées aux changements de concentration dans le milieu. Elle permet ainsi d'identifier les variations du profil de concentration à l'interface gaz–liquide. Toute variation locale de concentration induit une modification de la réfractivité qui représente une déformation du motif d'interférence. La comparaison des hologrammes enregistrés avant et après une perturbation permet alors de quantifier le transfert de masse à travers le profil de concentration. Bien que précise, la méthode nécessite une zone d'observation stable et un environnement optiquement isolé, car tout déplacement ou vibration perturbe les interférences. Zhu [176] ont utilisé cette technique pour étudier le transfert de masse du $CO_2$ à travers des bulles ascendantes dans une solution de monoéthanolamine.

### 2.3.2 Mesure des variations de volume, surface ou pression des bulles

La seconde approche inclut essentiellement deux méthodes pour évaluer le taux de transfert de masse. Elles consistent à suivre la variation du volume et de l'aire interfaciale des bulles ou à mesurer la différence de pression entre la bulle et la surface libre du liquide. La première technique, basée sur la taille et la forme, exige des bulles régulières, peu oscillantes et faciles à reproduire. La seconde ne fonctionne efficacement que pour des bulles d'au moins 6mm, car de plus petites bulles ne produisent pas de variations de pression détectables.

#### 2.3.2.1 Mesure de la différence de pression

Cette technique n'est applicable que pour des bulles dont le diamètre est au moins égal à 6mm [18, 58] afin de pouvoir détecter les variations de pression.

En s'appuyant sur cette approche expérimentale, Calderbank et Lochiel [18] ont étudié le transfert de masse autour de bulles de $CO_2$ dans l'eau. Les auteurs ont identifié une dépendance significative du coefficient de transfert de masse $k_\ell$ à la forme de la bulle (et donc à sa surface d'échange), ainsi qu'au régime d'écoulement. En s'intéressant également à la dissolution d'une bulle unique de $CO_2$ dans de l'eau, Garbarini et Tien [58] ont réalisé une étude comparative de deux méthodes expérimentales utilisées pour mesurer le transfert de masse : la méthode basée sur l'estimation des variations de pression induites par la dissolution des bulles et la méthode photographique, qui consiste à suivre les changements de taille et de position de la bulle à l'aide de caméras. Les résultats suggèrent que l'erreur associée à la détermination des vitesses instantanées de transfert de masse est notable, quelle que soit la méthode employée. Le principal facteur contribuant à cette difficulté est probablement l'imprécision dans l'estimation de la surface de la bulle, qui est l'élément crucial pour évaluer correctement le taux de transfert de masse.

#### 2.3.2.2 Mesure de variation de volume et de taille de bulles

Cette méthode permet de déterminer le taux de transfert de masse à partir de la mesure des variations de volume et de surface des bulles/gouttes obtenues par une analyse photographique à l'aide de caméras rapides. Elle requiert néanmoins que ces dernières conservent une forme régulière et ne présentent pas de fortes oscillations. Cette approche a été largement utilisée dans plusieurs études expérimentales tant pour l'estimation du transfert de masse, via le calcul du coefficient de transfert $k_\ell$ ou du nombre de Sherwood, que pour l'analyse de l'influence de divers paramètres sur ce transfert. En s'appuyant sur cette approche de capture d'images, les investigations expérimentales de [164, 3, 66, 136] se sont focalisées sur l'influence des surfactants sur le transfert de masse dans les bulles. La méthode expérimentale repose sur la mesure de la dissolution des bulles, traduite par la diminution de leur diamètre $d_0$ au cours du temps :

Vasconcelos, Orvalho et Alves [164] ont étudié le transfert de masse dans des bulles isolées peu solubles, immobiles dans un flux descendant d'eau pure et d'eau contaminée. Les auteurs ont observé que, dans un milieu propre, le transfert de masse se fait en deux phases : une phase initiale rapide où le transfert de masse est élevé, suivie d'un ralentissement attribué à l'accumulation de surfactants à la surface de la bulle. Dans l'eau contaminée, un seul régime lent et constant de transfert de masse est constaté, il s'agit

du régime typique des bulles rigides. Aoki, Hayashi et Tomiyama [3] ont analysé le transfert de masse autour de bulles de $CO_2$ présentant différentes topologies d'interface (sphéroïdale, oscillante, en calotte, bulle de Taylor) lors de leur ascension dans une colonne d'eau contaminée. Les résultats montrent que la contamination de l'interface ralentit significativement la circulation interne et externe autour des bulles, entraînant ainsi une diminution du transfert de masse par rapport à des bulles propres. Gómez-Díaz, Navaza et Sanjurjo [66] se sont également intéressés à l'absorption du $CO_2$ dans une colonne d'eau contaminée. Leurs résultats montrent que les tensioactifs peuvent soit améliorer, soit réduire le transfert de masse, selon leur type et leur concentration. À faible concentration, certains tensioactifs améliorent le transfert en stabilisant l'interface et en réduisant ses fluctuations. En revanche, à forte concentration, une adsorption importante de tensioactifs ralentit la circulation du liquide autour des bulles, diminuant ainsi le renouvellement interfacial, ce qui conduit à une baisse du taux de transfert. Sardeing, Painmanakul et Hébrard [136] ont également examiné différents types de tensioactifs (anioniques, cationiques et non ioniques) à diverses concentrations, à travers des expérimentations de transfert de masse dans une colonne à bulles ellipsoïdales évoluant dans de l'eau et dans des solutions aqueuses. Ils observent que la présence de tensioactifs modifie significativement l'interface gaz-liquide en réduisant la surface d'échange. Des modèles empiriques, intégrant l'effet de la contamination interfaciale, sont proposés afin de prédire les valeurs de $k_\ell$ dans des conditions industrielles réalistes.

Les études expérimentales de Deindoerfer et Humphrey [37] ont été consacrées à la détermination de l'impact du temps d'interaction bulle-liquide sur le taux de transfert de masse. Les auteurs ont exploré le transfert de masse dans le cadre de processus de fermentation aérobie, en étudiant la dissolution de bulles d'oxygène ascendantes dans un liquide. Les résultats montrent que le coefficient de transfert de masse diminue avec l'âge de la bulle, ce qui suggère que la circulation interne des bulles se dégrade au fur et à mesure de leur ascension, affectant ainsi le taux de dissolution.

D'autres recherches ont exploré expérimentalement le transfert de masse réactif : Takemura et Matsumoto [152] examinent le taux de dissolution de bulles sphériques de dioxyde de carbone dans de l'eau et dans des solutions alcalines concentrées ($NaOH$). Les résultats expérimentaux montrent que l'augmentation de la concentration en $NaOH$ accélère significativement la dissolution en renforçant les réactions chimiques interfaciales. Les expériences de Bao et al. [8] sur le transfert réactif de bulles d'oxygène dans un écoulement turbulent ont montré que la vitesse des bulles et le nombre de Reynolds de l'écoulement sont deux facteurs importants influençant le transfert de masse.

Il est à noter que la majorité de ces études expérimentales s'appuient sur l'évaluation du coefficient de transfert de masse dans la phase liquide, $k_\ell$, plutôt que sur celui de la phase gazeuse, $k_g$. Or, selon la théorie du double film (2.2.2.1), deux couches limites de diffusion se développent dans chacune des phases au voisinage de l'interface, et le transfert global est régi par le coefficient global défini par l'équation (2.37). Ce choix s'explique par la nature des gaz utilisés dans la plupart des procédés industriels, généralement peu ou moyennement solubles dans les liquides usuels, ce qui se traduit par une faible valeur de la constante de solubilité (He). Dans ces conditions, la résistance dominante au transfert se situe dans la phase liquide, où le gradient de concentration est confiné dans une zone très mince ; le coefficient global se réduit alors pratiquement au coefficient liquide, soit $K_\ell \approx k_\ell$.

## 2.4 Investigations numériques

Les simulations numériques directes constituent aujourd'hui un outil puissant pour obtenir des informations détaillées sur le transfert de masse dans les écoulements diphasiques. Elles permettent notamment l'accès aux informations fines du champ de concentration et de la dynamique de l'écoulement autour des bulles ou des gouttes. Elles offrent également la possibilité d'intégrer des aspects complexes, souvent difficiles à quantifier expérimentalement, tels que la déformation de l'interface ou la variation de volume due à leur dissolution. Toutefois, une modélisation numérique précise de ces phénomènes demeure un défi, compte tenu des deux principales difficultés qu'ils soulèvent :

— D'une part, le saut homothétique de variables à l'interface, régi par la condition de solubilité décrite par la loi de Henry pour les systèmes gaz-liquide, ou par ses généralisations, comme le coefficient de partition pour les contacteurs liquide-liquide, par exemple. Cette discontinuité impose une prise en compte rigoureuse des relations de saut dans les modèles mathématiques employés pour la modélisation de ces phénomènes, afin de respecter le caractère discontinu de la physique du transfert de masse.

— D'autre part, les fortes contraintes de résolution spatiale constituent une difficulté majeure. En effet, la couche limite de diffusion, zone où les gradients de concentration sont significatifs, est souvent plus fine de plusieurs ordres de grandeur que la couche limite dynamique. Cette caractéristique est particulièrement marquée dans les régimes dominés par les effets visqueux, où la diffusion moléculaire est lente, se traduisant par un nombre de Schmidt élevé ($Sc \gg 1$). Cette disparité d'échelles implique une résolution spatiale d'autant plus fine au voisinage de l'interface que le nombre de Schmidt est élevé ($Sc$), afin de correctement capturer les phénomènes de

transfert de masse. Une telle exigence se traduit par un coût de calcul prohibitif. Ces contraintes ont suscité de nombreuses recherches, révélant la complexité intrinsèque du transfert de masse dans les écoulements diphasiques. Pour mieux comprendre et modéliser ces phénomènes, plusieurs approches numériques ont été développées, que nous présentons ci-dessous.

### 2.4.1 Résolution de transfert de masse dans une unique phase

De nombreux travaux numériques se sont intéressés aux phénomènes de transfert de masse, en résolvant l'équation d'advection-diffusion des espèces que dans une unique phase. La résistance au transfert de masse étant principalement localisée dans une seule phase, souvent liquide, en raison d'une diffusion plus lente. La phase complémentaire, généralement gazeuse, est, quant à elle, supposée parfaitement mélangée grâce à une diffusivité plus élevée. Cette hypothèse conduit à considérer que la concentration dans cette phase est maintenue à une valeur quasi constante, estimée par la loi de Henry. Cette concentration, considérée comme constante, est imposée comme une condition aux limites de Dirichlet à l'interface gaz-liquide pour la résolution de l'équation dans la phase où la résistance au transfert est prédominante.

En adoptant cette hypothèse, Butler et al. [16] ont exploré les transferts de masse dans les bulles de Taylor en résolvant l'équation d'advection-diffusion de concentration uniquement dans la phase liquide, avec une condition limite de Dirichlet fixée à la concentration de saturation. La méthode Level-set pour la localisation de l'interface, combinée avec la méthode "Ghost-fluid" pour gérer les discontinuités des contraintes visqueuses et de la pression, est considérée dans leur travail. En considérant la même approche numérique pour la résolution de l'écoulement, d'autres auteurs ont analysé et quantifié l'influence des tensioactifs insolubles sur la dynamique et le transfert de masse à travers des bulles sphériques [88] et déformables [87]. Le transport des tensioactifs insolubles à la surface de la bulle est décrit par une équation d'advection-diffusion à la surface, dans laquelle le terme de diffusion de surface est négligé. La condition du saut de Marangoni a été prise en compte par une méthodologie spécifique dans les cellules traversées par l'interface. D'autres études numériques se sont intéressées à l'impact de la contamination de l'interface sur le transfert, notamment Lalanne, Masbernat et Risso [92], qui ont analysé l'amortissement des oscillations de forme d'une goutte dues à l'adsorption des contaminants à son interface. L'étude a montré que la mesure de ce taux d'amortissement est très sensible à la présence de contaminants, offrant ainsi un moyen simple et efficace pour évaluer le niveau de contamination, en se basant sur la théorie linéaire des oscillations de forme. Dani et al. [33] ont effectué une étude numérique pour une gamme de nombres de

Reynolds modérés ($1 \leq Re \leq 300$) et de nombres de Schmidt ($1 \leq Sc \leq 500$), afin de déterminer l'impact de la contamination de la surface des bulles sur le transfert de masse entre des bulles de gaz sphériques et le liquide environnant. Les auteurs considèrent différents degrés de contamination de la surface de la bulle, caractérisée par l'angle de calotte stagnante $0° \leq \theta_{cap} \leq 180$, qui définit l'étendue de la zone immobile en raison de la contamination. Afin d'examiner l'effet de l'accumulation de contaminants aux interfaces, tout en considérant les réactions chimiques, Jia et Zhang [80] ont mené une étude numérique approfondie sur le transfert de masse réactif d'une bulle sphérique de $CO_2$, ascendante dans une solution alcaline ($NaOh$) contaminée. La présence de contaminants est modélisée en utilisant le modèle "stagnant-cap-model", et le transfert d'espèces dans la phase liquide est décrit par l'équation de convection-diffusion. Bourdon et al. [11] ont combiné l'expérience avec la simulation numérique pour étudier le transfert de masse à travers des bulles d'éthylacétate s'évaporant dans un flux d'azote dans un écoulement de bulles de Taylor.

### 2.4.2 Méthode de Lattice Boltzmann pour le transfert de masse

Dans le contexte de la méthode de Lattice Boltzmann, plusieurs recherches [175, 56, 97, 68, 153, 104, 105] ont été menées pour étudier numériquement le transfert de masse, elles sont détaillées ci-après.

Fu et al. [56] ont utilisé la méthode de Boltzmann (LBM) pour modéliser le transfert de masse interfacial du $CO_2$ dans une solution de chlorure de sodium ($NaCl$) en intégrant les forces électrostatiques et volumiques. Les auteurs ont examiné l'effet de la concentration en sel sur le taux de transfert de masse et le temps d'apparition de la convection de Rayleigh induite par la dissolution du $CO_2$. Leur principale conclusion est que l'augmentation de la concentration en sel ($NaCl$) réduit le facteur de transfert de masse et retarde le temps d'apparition de la convection de Rayleigh. Pour analyser l'impact du phénomène de la convection de Rayleigh sur le taux de transfert de masse, Zheng et al. [175] se sont intéressés à l'absorption du dioxyde de carbone $CO_2$ dans l'éthanol. L'approche LBM a également été employée pour traiter le transfert de masse conjugué par Tan et al. [153], en prenant en compte le saut de concentration à l'interface imposé par la loi de Henry. Les auteurs proposent une nouvelle équation de Boltzmann unifiée (LBM) qui vise à surmonter les difficultés de modélisation de cette discontinuité qui représente un aspect complexe du transfert de masse conjugué. Lu, Lei et Dai [104] ont montré que, dans le contexte de la méthode de Lattice Boltzmann, le saut de concentration imposé par la loi de Henry au niveau de l'interface peut être pris en compte en modifiant les coefficients de pondération dans les fonctions de distribution. En combinant le coefficient de Henry et le coefficient

de diffusion pour obtenir un coefficient de diffusion équivalent, Lu, Lei et Dai [105] ont poursuivi leurs précédents travaux [104] et ont modifié le terme de flux de diffusion de l'équation d'advection-diffusion des espèces.

### 2.4.3 Modèle sous-maille pour le transfert de masse

Pour pallier les difficultés associées à la très fine épaisseur de la couche limite massique, accentuée par la dominance du transport convectif ($Sc \gg 1$), plusieurs travaux ont porté sur le développement de modèles sous-maille (SGS) [1, 29, 169, 170, 17]. Ces modèles visent à décrire le profil de concentration au sein de la couche limite de diffusion, permettant ainsi une prédiction efficace du transfert de masse sans nécessiter une résolution spatiale au coût prohibitif. Selon les travaux, ces modèles sont combinés à des approches à 1-fluide ou à 2-fluides.

Dans le cadre des méthodes Front-Tracking de suivi d'interface, Aboulhasanzadeh et al. [1] ont proposé une approche multi-échelles intégrant un modèle sous-maille (SGS), pour mieux décrire le transfert de masse aux interfaces des bulles ascendantes. Le travail propose de décomposer le champ de concentration en deux parties : une résolue sur une grille eulérienne et l'autre modélisée par une description de la couche limite. Une équation parabolique est dérivée pour décrire l'évolution de la concentration dans la couche limite, en tenant compte de la diffusion normale à l'interface et de la déformation due à la vitesse tangentielle. Un profil de concentration polynomial du second ordre est utilisé pour approximer la résolution. Dans la continuité de ces travaux, Claassen et al. [29] ont proposé une amélioration du modèle sous-maille de Aboulhasanzadeh et al. [1], essentielle à la conservation de la masse. Cette amélioration vise principalement à empêcher un transfert artificiel induit par les opérations de remaillage. Les auteurs proposent également une meilleure approximation de la distribution de concentration dans la couche limite, fondée sur l'utilisation d'une fonction d'erreur complémentaire "Erfc". Les deux formulations de la distribution de masse au sein de la couche ont été évaluées à l'aide de simulations de transfert de masse dans des régimes rampant et potentiel, couvrant une plage de nombres de Schmidt comprise entre ($10^3 - 10^5$). Les travaux de Weiner et al. [170] suggèrent une version améliorée du modèle de Claassen et al. [29]. L'amélioration concerne la gestion de la concentration à l'extrémité de la couche limite massique, qui marque la limite entre la partie modélisée par le SCG et la partie résolue. Les auteurs proposent d'appliquer implicitement la concentration à la fin de la couche limite via une méthode de frontière immergée. Le modèle a été validé en le comparant à une approche de simulation monophasique qui résout uniquement la phase liquide sur un maillage très fin. Weiner et Bothe [169] proposent une approche qui combine une DNS pour la résolution

de l'écoulement avec un nouveau modèle SGS pour calculer le transfert de masse dans le cadre d'une simulation VOF de bulles ascendantes dans un liquide. Les auteurs montrent que le modèle SGS réduit les exigences de résolution à l'interface d'un facteur de dix ou plus. Dans le cadre d'un formalisme à 2-fluides pour la résolution de l'équation de concentration, Cai et al. [17] ont développé un modèle sous-maille basé sur la méthode VOF géométrique pour les maillages hexaédriques, afin de simuler avec précision le transfert de masse entre gaz et liquide, particulièrement dans des scénarios à nombres de Péclet élevés.

### 2.4.4 Modèle continu : à 1-fluide pour le transfert de masse

Plusieurs travaux ont également exploré numériquement le transfert de masse en utilisant un modèle continu à interface diffuse, qui consiste à étaler l'information au niveau de l'interface et à considérer un mélange dans les mailles. Ce modèle introduit un terme supplémentaire dans l'équation d'advection-diffusion des espèces, permettant de représenter la physique du transfert diffusif à l'interface, caractérisée par un saut de variable et une continuité du flux de diffusion.

Ce modèle a initialement été proposé par Haroun, Raynal et Legendre [71] pour examiner le transfert de masse réactif dans un film liquide. Des cas tests élémentaires ont été réalisés pour valider le formalisme à 1-fluide proposé pour l'équation des espèces. Dans l'objectif de simuler le transfert de masse multi-composants à travers des interfaces fluides en mouvement, notamment la dissolution d'une bulle de Taylor, Fleckenstein et Bothe [52] ont fourni une démonstration rigoureuse du formalisme à 1-fluide, en partant des travaux de Haroun, Raynal et Legendre [71]. Ces démonstrations ont été exploitées par Weiner et Bothe [169] pour développer un modèle à 1-fluide avancé, appelé modèle de Transfert Continu d'Espèces (CST), pour les simulations du transfert d'espèces dans des écoulements à bulles. Les auteurs montrent que différentes formulations peuvent être obtenues en fonction de la moyenne utilisée pour le coefficient de diffusivité effectif (arithmétique, harmonique ou hybride), la formulation hybride est considérée dans le modèle CST final. Maes et Soulaine [107] ont proposé une version améliorée du modèle unifié CST pour simuler le transfert de masse interfacial, en tenant compte des variations locales de volume. Leur formalisme à 1-fluide a été appliqué à la simulation de la dissolution d'une bulle ascendante à faible nombre de Schmidt. Les auteurs ont montré la capacité du modèle proposé à gérer des géométries complexes grâce à sa compatibilité avec les maillages non structurés. Les travaux de Farsoiya, Popinet et Deike [46] et Farsoiya et al. [47] ont exploré les transferts de masse dans les régimes d'écoulement turbulent homogène et isotrope (THI) pour des nombres de Schmidt $Sc = 1, 10, 100$. Les

auteurs proposent une loi d'échelle décrite par $Sh/Sc^{1/2} \propto Re^{3/4}$, où $Sh$ et $Re$ sont définis avec l'échelle de longueur intégrale $L$ de la turbulence. En combinant la méthode de Lattice Boltzmann à l'approche de mélange de [52], Tan et al. [154] se sont intéressés à la modélisation du transfert de masse à travers des bulles déformables en examinant différents rapports de densité, de coefficients de diffusion et de viscosité, ainsi que l'influence de la taille de la bulle sur la vitesse de transfert de masse. Suite à leur étude, ils ont fourni une corrélation du coefficient de transfert de masse en tenant compte de la forme de la bulle.

### 2.4.5 Modèle discontinu : à deux champs pour le transfert de masse

De nombreux auteurs ont mis l'accent sur les défis numériques liés à la gestion des discontinuités induites par le saut homothétique de concentration à l'interface. Pour y remédier, une autre catégorie d'approches à à 2-fluides, concurrentes à l'approche à 1-fluide évoquée précédemment, a été développée. Elle consiste à résoudre chaque phase séparément, ce qui permet de conserver le caractère raide de la physique des transferts de masse.

Dans ce contexte, Bothe et Fleckenstein [10], ont établi une approche à deux champs scalaires, basée sur la modélisation VOF géométrique pour étudier le transfert de masse conjugué à travers des interfaces fluides déformables. Leur approche est couplée à un modèle sous-maille (SGS) pour résoudre efficacement la fine couche limite de concentration, en particulier pour des simulations de transfert d'oxygène à partir de bulles à grand nombre de Schmidt ($Sc$). Le transfert de masse conjugué dans une goutte sphérique dans un liquide immiscible a également été considéré par Rachih et al. [124]. Le but est d'analyser l'influence des paramètres physiques tels que : le nombre de Reynolds, la viscosité, les coefficients de diffusivité et la constante de saut, sur le taux de transfert de masse entre la goutte et son environnement liquide. Les équations qui décrivent l'écoulement et le transfert de masse sont résolues dans chacune des phases en utilisant un système de coordonnées curvilignes orthogonales. Dans la continuité de ces résultats, Godé et al. [64] ont approfondi cette analyse et proposé des corrélations améliorées pour les nombres de Sherwood interne, externe et conjugué. Cependant, ces deux dernières études se limitaient au cas de gouttes stationnaires. Gründing, Fleckenstein et Bothe [67] ont adopté une démarche numérique à deux-champs pour explorer le transfert de masse réactif, pour lequel ils proposent un modèle sous-maille réactif (SGSR). Ce modèle (SGSR) a été validé sur des cas de bulles sphériques en régime de Stokes et pour des nombres de Schmidt $Sc$ élevés ($Sc = 250, 1000$). Tourbier [158] ont également abordé le transfert de masse réactif dans des bulles de Taylor, en adoptant une approche à deux fluides, combinée à la

méthode VOF géométrique. Une attention particulière a été portée au transfert artificiel résultant du problème de diffusion numérique liée aux schémas de discrétisation du terme de transport traditionnellement utilisés. Maarek [106] dans son travail de thèse a abordé la problématique du transfert de masse dominé par la convection, en utilisant un modèle à deux fluides combiné à un modèle sous maille (SGS) pour représenter la distribution sous maille des espèces à l'aide d'un profil analytique de couche limite. Inspiré des travaux antérieurs de Aboulhasanzadeh et al. [1], Claassen et al. [29], et Bothe et Fleckenstein [10], le modèle a été généralisé à diverses dynamiques d'interface grâce à l'intégration de réseaux de neurones. Son applicabilité a été démontrée en simulant le transfert de masse dans un système triphasique (air-huile-eau) représentant un modèle réduit de poche de raffinage métallurgique.

## 2.5 Apport du présent travail

Comme l'a mis en évidence l'étude bibliographique précédente, le transfert de masse dans les écoulements diphasiques a suscité de nombreuses études de recherche visant à relever les défis posés par ces phénomènes et à apporter une vision plus claire de leur physique. Numériquement, le caractère discontinu qu'implique la physique des transferts de masse, régi par la loi de solubilité de Henry, complexifie leur modélisation. De manière générale, deux principales catégories d'approches de modélisation sont employées :

— les approches à 2-fluides, présentant l'avantage d'offrir une solution discontinue représentative de la physique du transfert de masse. Cependant, lorsque les structures diphasiques sont mobiles, elles reposent sur l'utilisation des maillages mobiles et déformables suivant l'interface, complexes à mettre en œuvre et coûteux en calcul. Bien que ces approches puissent être appliquées sur des maillages eulériens fixes, elles présentent des difficultés similaires liées au traitement explicite des interfaces en mouvement. Le déplacement de l'interface entraîne l'apparition ou la disparition de cellules diphasiques, souvent de forme irrégulière, ce qui complique la reconstruction, l'évaluation des flux et la gestion des opérateurs de couplage. De plus, les petites cellules proches des coins imposent de fortes contraintes sur le pas de temps en raison des conditions de stabilité et du critère CFL. Ces méthodes nécessitent également des interpolations sophistiquées pour la reconstruction du champ de concentration à travers l'interface, ce qui accroît leur complexité et leur coût.
— les approches à 1-fluide, qui ont l'avantage d'employer des grilles fixes, palliant ainsi aux difficultés liées aux maillages mobiles. En revanche, elles présentent la faiblesse de produire une solution homogène, induisant la perte du caractère discontinu des variables à l'interface. Pour des raisons de comparaison, cette approche a été implé-

mentée dans le cadre de cette thèse, au sein du code maison Fugu.

L'approche numérique développée dans le présent travail s'inscrit dans la catégorie des approches de modélisation à deux-champs. Elle vise à préserver le caractère discontinu inhérent à la physique du transfert de masse, en assurant une représentation phasique du champ de concentration. L'idée fondatrice consiste à combiner les avantages de chacune des méthodes classiques citées précédemment, notamment la simplicité des maillages cartésiens fixes employés dans les méthodes à 1-fluide, et la solution discontinue offerte par les méthodes à 2-fluides. Dans cette optique, nous proposons une résolution phasique sur un maillage structuré et fixe, en résolvant une unique équation d'advection–diffusion dans chaque cellule de maillage. Pour cela, une version adaptée de la méthode Ghost-Fluid est utilisée afin de traiter correctement les flux diffusifs sur les faces des mailles diphasiques. Ainsi, le modèle intègre explicitement, dans le schéma numérique, les relations de saut imposées à l'interface, qui traduisent la discontinuité de la concentration et la continuité du flux diffusif. Ce traitement du terme diffusif est couplé à un schéma de transport géométrique identique à celui utilisé pour le transport de l'interface, ce qui assure un déplacement synchronisé entre le champ de concentration et la fraction volumique. Cette étape est essentielle, car elle évite l'apparition d'oscillations numériques susceptibles de parasiter le champ de concentration. Cette approche de modélisation est comparée à un modèle homogène à 1-fluide, disponible dans la littérature. La comparaison porte sur la précision et l'ordre de convergence des solutions numériques issues des approches à 1-fluide et à deux champs, en s'appuyant sur le champ de concentration et le flux de masse échangé entre les phases, mesuré par le nombre de Sherwood. Enfin, leurs limites respectives et leur pertinence sont discutées selon les différents régimes de transfert de masse : intérieur, extérieur et conjugué.

CHAPITRE 3

# Modélisation des écoulements diphasiques avec transfert de masse

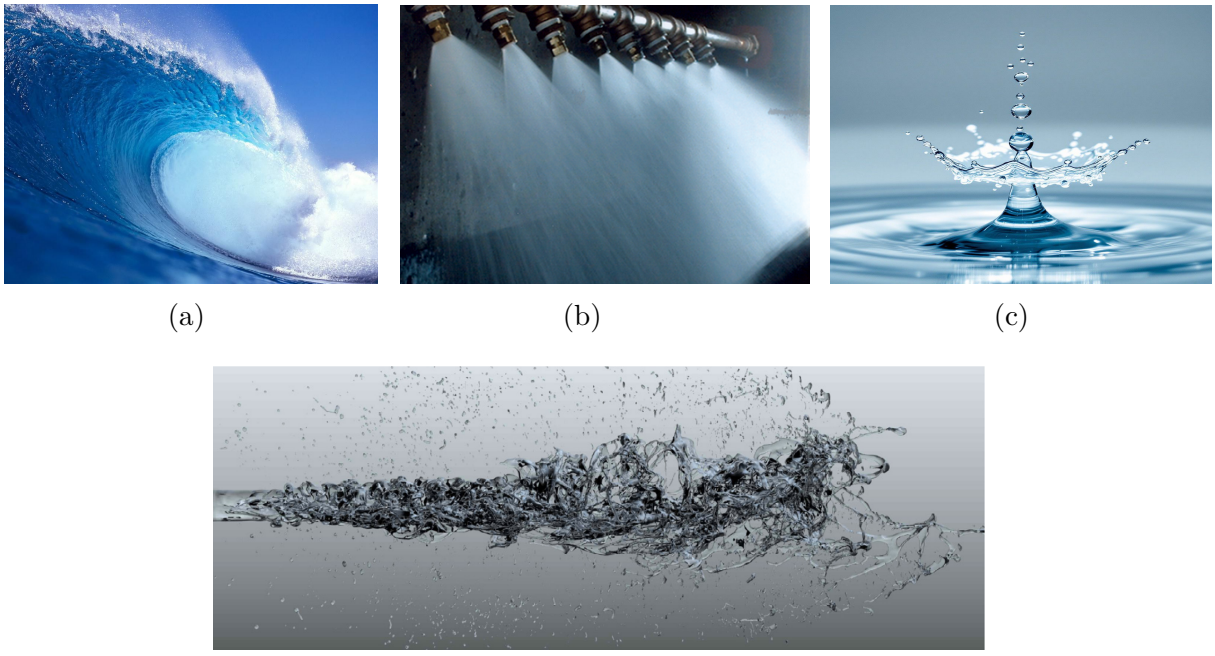
## Structure du chapitre


3.1 Modélisation par phase : modèle 2-fluides pour les interfaces résolues . . . 69
3.1.1 Bilan de conservation de la masse . . . 70
3.1.2 Bilan de quantité de mouvement . . . 71
3.1.3 Bilan de conservation des espèces . . . 72
3.1.4 Relations d'équilibre à l'interface . . . 73
3.2 Modèle à 1-fluide pour l'ensemble des équations de conservation . . . 74
3.2.1 Transport de l'interface . . . 75
3.2.2 Conservation de la masse : $\Phi_p = \rho_p$ . . . 77
3.2.3 Conservation de la quantité de mouvement : $\Phi_p = \rho_p \mathbf{u}_p$ . . . 78
3.2.4 Conservation des espèces : $\Phi_p = C_p$ . . . 79
3.2.5 Filtrage des équations du formalisme à 1-fluide . . . 81

Les écoulements diphasiques se caractérisent par la présence simultanée de plusieurs phases immiscibles, telles qu'un liquide et un gaz. Ils interviennent dans une large variété d'applications en raison de la diversité des phénomènes physiques qui leur sont associés, notamment les transferts de chaleur ou de masse dans les échangeurs thermiques et les réacteurs chimiques. Leur classification repose fondamentalement sur la topologie de l'interface entre les phases. On distingue généralement trois grandes catégories d'écoulements diphasiques [171] :

— **Les écoulements stratifiés ou à phases séparées :** tels que les écoulements annulaires ou à film.
— **Les écoulements intermittents :** comme les écoulements bouchons (slug).
— **Les écoulements à phase dispersée :** où l'une des phases se présente sous forme de bulles, de gouttes ou de particules.

C'est cette dernière catégorie d'écoulement qui est considérée dans cette thèse.



(a) (b) (c)

(d)

Figure 3.1 – Illustrations de phénomènes diphasiques à phase dispersée : (a) déferlement d'une vague avec cascade d'échelles interfaciales [161], (b) pulvérisation d'un jet liquide à l'aide d'un système de spray [111], (c) impact de goutte générant des structures diphasiques éjectées [143], (d) fragmentation primaire d'un jet liquide [24].

La modélisation des écoulements diphasiques implique une description précise des phénomènes physiques propres à chaque phase, ainsi que leurs interactions à travers l'interface. Dans le cadre du présent travail, consacré à l'étude des transferts de masse à l'interface

d'un écoulement diphasique liquide-gaz, un bref état de l'art des principales approches de modélisation est proposé. Celui-ci se concentre principalement sur les modélisations à deux-fluides et sur celle à un fluide, dans le but d'établir un formalisme général adapté au contexte étudié. Ainsi, dans ce qui suit, ces deux approches, basées respectivement sur une description séparée des deux phases (2-fluide), et une description monofluide, sont présentées.

## 3.1 Modélisation par phase : modèle 2-fluides pour les interfaces résolues

La modélisation à 2-fluides consiste à résoudre les équations de conservation dans chacune des phases du domaine. Dans cette approche, l'interface séparant les deux phases est considérée comme une surface de discontinuité matérielle dans le système fluide. Ainsi, les solutions monophasiques par phase sont raccordées par des relations de saut traduisant la physique souhaitée à l'interface.

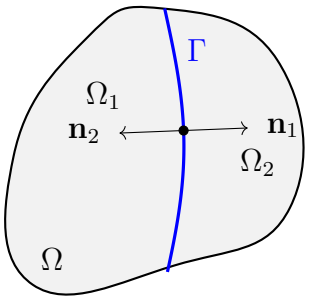



FIGURE 3.2 – Illustration du domaine diphasique $\Omega$ composé des sous-domaines $\Omega_1$ et $\Omega_2$, séparés par l'interface $\Gamma$, avec les normales sortante $\mathbf{n}_1$ et entrante $\mathbf{n}_2$ du sous-domaine à $\Omega_1$.

Supposons le domaine de la figure 3.2, composé de deux phases immiscibles, occupant respectivement les sous domaines $\Omega_1$ et $\Omega_2$, séparées par une interface $\Gamma$. L'équation de conservation d'une grandeur $\Phi$, dans chacune des phases continues $p \in \{1, 2\}$, est exprimée par l'équation du bilan dans un volume matériel $\Omega_p$, délimité par le contour $\partial\Omega_p$, celle-ci est donnée par :

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega_p} \Phi_p \, \mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega_p} \Phi_{Sp}.\mathbf{n} \, \mathrm{d}S + \int_{\Omega_p} \Phi_{Vp} \, \mathrm{d}V \tag{3.1}$$

Les termes $\Phi_{Vp}$ et $\Phi_{Sp}$ représentent respectivement les contributions volumique et surfacique, qui font varier la grandeur $\Phi_p$. Le bilan local de la quantité $\Phi_p$ en tout point du domaine s'écrit donc comme suit :

$$\frac{\partial \Phi_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_p \Phi_p) = \nabla \cdot (\Phi_{Sp}) + \Phi_{Vp} \tag{3.2}$$

Selon la grandeur $\Phi$ étudiée, les termes de l'équation (3.2) sont explicités dans le tableau (3.1) ci-dessous. Cela permet d'établir les équations correspondant aux bilans de masse, de quantité de mouvement et de concentration des espèces, qui composeront le modèle mathématique utilisé dans ce travail.

TABLE 3.1 – Explicitation des termes $\Phi, \Phi_V, \Phi_S$

| Grandeur | $\Phi$ | $\Phi_V$ | $\Phi_S$ |
|---|---|---|---|
| Masse | $\rho$ | 0 | 0 |
| Quantité de mouvement | $\rho\mathbf{u}$ | $\rho\mathbf{g}$ | $\overline{\boldsymbol{S}}$ |
| Concentration | $C$ | 0 | $\mathbf{J}$ |

Où $\rho\,[\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3}]$, $\mathbf{u}\,[\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}]$, $\mathbf{g}\,[\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-2}]$ et $\overline{\boldsymbol{S}}\,[\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-1}\,\mathrm{s}^{-2}]$ désignent respectivement la masse volumique du fluide, la vitesse de l'écoulement, l'accélération gravitationnelle et le tenseur des taux de déformation. Les grandeurs $C\,[\mathrm{mol}\cdot\mathrm{m}^{-3}]$ et $\mathbf{J}\,[\mathrm{mol}\cdot\mathrm{m}^{-2}\cdot\mathrm{s}^{-1}]$ représentent, quant à elles, le champ de concentration et le flux de masse.

### 3.1.1 Bilan de conservation de la masse

L'application du principe de conservation de la masse au volume matériel $\Omega_p$, où $p \in \{1, 2\}$ désigne la phase considérée, conduit à l'expression suivante :

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega_p(t)} \rho_p \,\mathrm{d}V = 0 \tag{3.3}$$

En combinant la dérivée particulaire avec le théorème de Reynolds, la variation temporelle de la quantité totale $F_p(t)$, définie par $F_p(t) = \int_{\Omega_p(t)} f_p(\mathbf{x}, t)\,\mathrm{d}V$, associée à un volume de fluide $\Omega_p$, s'écrit :

$$\frac{dF_p(t)}{dt} = \frac{d}{dt}\int_{\Omega_p(t)} f_p(\mathbf{x}, t)\,\mathrm{d}V = \int_{\Omega_p(t)} \left[\frac{\partial f_p}{\partial t} + \nabla\cdot\left(f_p\mathbf{u}_p\right)\right]\,\mathrm{d}V. \tag{3.4}$$

où $\mathbf{u}_p$ est la vitesse de déplacement locale de la phase $p$, l'équation (3.3) devient :

$$\int_{\Omega_p(t)} \left[\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho_p\mathbf{u}_p)\right]\,\mathrm{d}V = 0 \tag{3.5}$$

Sachant que l'égalité en (3.5) est assurée quel que soit le volume $\Omega_p(t)$, l'équation phasique de la conservation de la masse locale pour chaque phase est alors retrouvée,

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho_p\mathbf{u}_p) = 0 \tag{3.6}$$

Dans le cas des fluides incompressibles, la masse volumique est constante, l'équation de conservation de la masse phasique devient alors :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_p = 0 \tag{3.7}$$

### 3.1.2 Bilan de quantité de mouvement

La quantité de mouvement d'une particule fluide se trouvant dans la phase $\Omega_p(t)$ est donnée par :

$$M_p(t) = \int_{\Omega_p(t)} \rho_p \mathbf{u}_p \, \mathrm{d}V \tag{3.8}$$

En se basant sur le deuxième principe de la dynamique, la variation temporelle de la quantité de mouvement $\frac{dM(t)}{dt}$ sur le volume $\Omega_p$ est égale à la résultante des forces qui s'exercent sur celui-ci. Ces forces sont composées de forces volumiques dues aux effets de la gravité, ainsi que de forces surfaciques dues aux effets de pression et de contraintes visqueuses. La variation de la quantité de mouvement s'écrit alors comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{dM_p(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega_p(t)} \rho_p \mathbf{u}_p \, \mathrm{d}V \\ &= \int_{\Omega_p(t)} \rho_p \mathbf{g} \, \mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega_p(t)} \overline{\boldsymbol{S}}_p \cdot \mathbf{n}_p \, \mathrm{d}S \end{aligned} \tag{3.9}$$

où $\overline{\boldsymbol{S}}_p$ est le tenseur des taux de déformation de la phase $p$ et $\mathbf{n}_p$ est le vecteur normal extérieur du domaine $\Omega_p(t)$.
L'application de la dérivée particulaire, combinée au théorème de Reynolds selon (3.4) à la variation de la quantité de mouvement établie en (3.9), donne l'équation de la quantité de mouvement locale :

$$\frac{\partial \rho_p \mathbf{u}_p}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \rho_p \mathbf{u}_p \otimes \mathbf{u}_p \right) = \rho_p \mathbf{g} + \nabla \cdot \overline{\boldsymbol{S}}_p \tag{3.10}$$

Pour un fluide incompressible, le tenseur des contraintes $\overline{\boldsymbol{\tau}}_p$ est donné par :

$$\overline{\boldsymbol{S}}_p = -p_p \overline{\mathbf{I}} + \overline{\boldsymbol{\tau}}_p \tag{3.11}$$

où $\overline{\mathbf{I}}$ est le tenseur identité, $\overline{\boldsymbol{\tau}}_p$ est le tenseur des taux de déformation de la phase $p \in \{1, 2\}$, exprimé tel que :

$$\overline{\boldsymbol{\tau}}_p = \mu_p \left[ \nabla \mathbf{u}_p + (\nabla \mathbf{u}_p)^\intercal \right] \tag{3.12}$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement pour une phase incompressible

s'écrit finalement :

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}_p}{\partial t} + \nabla \cdot \Big(\rho_p \mathbf{u}_p \otimes \mathbf{u}_p\Big) = \rho_p \mathbf{g} - \nabla p_p + \nabla \cdot \overline{\boldsymbol{\tau}}_p \tag{3.13}$$

### 3.1.3 Bilan de conservation des espèces

Le taux de variation de la masse $m_p^A$ de l'espèce chimique $A$, présente dans la phase $p \in \{1, 2\}$ et occupant un volume matériel $\Omega_p$, est donné par :

$$\frac{dm_p^A}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega_p(t)} \rho_p Y_p^A \, \mathrm{d}V \tag{3.14}$$

où $Y_p^A$ représente la fraction massique de l'espèce A dans la phase $p$.

La variation temporelle de la masse $m_p^A$ dans le volume $\Omega_p$ est obtenue en combinant le transfert diffusif décrit par la loi de Fick et le bilan du transport convectif. D'une part, à partir du théorème de transport de Reynolds, il vient :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_p(t)} \rho_p \, Y_p^A \, \mathrm{d}V = \int_{\Omega_p(t)} \frac{\partial}{\partial t}\Big(\rho_p \, Y_p^A\Big) \, \mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega_p(t)} \rho_p \, Y_p^A \, (\mathbf{u}_p \cdot \mathbf{n}_p) \, \mathrm{d}S. \tag{3.15}$$

D'autre part, en utilisant l'équation générale (3.1) pour $\phi = \rho_p Y_p^A$, on a :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_p(t)} \rho_p Y_p^A \, \mathrm{d}V = - \int_{\Omega_p(t)} \mathbf{J}_p^A \cdot \mathbf{n}_p \, \mathrm{d}S \tag{3.16}$$

avec $\mathbf{J}_p^A$ est le flux de diffusion Fickien défini par :

$$\mathbf{J}_p^A = -\rho_p D_p^A \nabla Y_p^A \tag{3.17}$$

où $D_p^A \, [\mathrm{m}^2 \, \mathrm{s}^{-1}]$ est le coefficient de diffusion de l'espèce $A$ dans la phase $p \in \{1, 2\}$.

La combinaison des équations du transport convectif et diffusif établies en (3.15) et (3.16) mène au bilan de conservation de la masse de l'espèce $A$ dans la phase $p \in \{1, 2\}$,

$$\int_{\Omega_p(t)} \frac{\partial}{\partial t}\Big(\rho_p Y_p^A\Big) \, \mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega_p(t)} \rho_p Y_p^A \, (\mathbf{u}_p \cdot \mathbf{n}_p) \, \mathrm{d}S = - \int_{\partial\Omega_p(t)} \mathbf{J}_p^A \cdot \mathbf{n}_p \, \mathrm{d}S. \tag{3.18}$$

Ainsi, par passage à la limite, l'équation locale de conservation de l'espèce $A$ dans la phase $p \in \{1, 2\}$ en tout point est retrouvée :

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big(\rho_p \, Y_p^A\Big) + \nabla \cdot \Big(\rho_p \, Y_p^A \, \mathbf{u}_p\Big) = - \nabla \cdot \mathbf{J}_p^A. \tag{3.19}$$

En divisant l'équation (3.19), exprimée en fraction massique $Y_p^A[-]$, par la masse molaire du soluté $[\mathrm{kg}\cdot\mathrm{mol}^{-1}]$, on obtient l'équation de conservation de la concentration molaire des espèces, donnée par :

$$\frac{\partial C_p^A}{\partial t} + \nabla\cdot\left(C_p^A\mathbf{u}_p\right) = -\nabla\cdot\mathbf{J}_p \tag{3.20}$$

avec $\mathbf{J_p}$, le flux de diffusion Fickien donné en fonction de la concentration de l'espèce : $\mathbf{J}_p = -D_p^A\nabla C_p^A$, et $C_p$ la concentration molaire en $[\mathrm{mol}\cdot\mathrm{m}^{-3}]$.

Dans la suite, afin d'alléger l'écriture des équations, l'exposant $A$, qui désigne l'espèce chimique présente dans la phase $p \in \{1,2\}$, sera omis. En effet, chaque phase est supposée être polluée par une unique espèce. Ainsi, l'équation de la concentration s'écrit :

$$\frac{\partial C_p}{\partial t} + \nabla\cdot\left(C_p\mathbf{u}_p\right) = -\nabla\cdot\left(D_p\nabla C_p\right) \tag{3.21}$$

### 3.1.4 Relations d'équilibre à l'interface

Dans le modèle à 2-fluides, l'interface est considérée comme une discontinuité qui est prise en compte à travers des relations de saut exprimant les équilibres mécanique et chimique à l'interface. Les équations de conservation définies précédemment dans (3.7), (3.13) et (3.21) sont alors satisfaites dans chacune des phases $\Omega_p$, et les relations de saut définies ci-après sont satisfaites à l'interface $\Gamma$.

Sous l'hypothèse d'absence de changement de phase, la continuité des vitesses normales est assurée à l'interface, celles-ci sont égales à la vitesse géométrique de l'interface selon :

$$\mathbf{u}_1\cdot\mathbf{n}_1 = -\mathbf{u}_2\cdot\mathbf{n}_2 \tag{3.22}$$

où $\mathbf{u}_1$ et $\mathbf{u}_2$ désignent les vitesses des phases 1 et 2, et $\mathbf{n}_1$ et $\mathbf{n}_2$ leurs normales unitaires sortantes respectives ($\mathbf{n}_1 = -\mathbf{n}_2$). Sous l'hypothèse du non glissement local pour la composante tangentielle, on obtient :

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 \tag{3.23}$$

Le saut du tenseur des contraintes est donné dans les directions normale et tangentielle à l'interface par :

$$\begin{cases} \mathbf{n}\cdot(\overline{\mathbf{S}}_1 - \overline{\mathbf{S}}_2)\cdot\mathbf{n} = \sigma\,\kappa, \\ \mathbf{t}\cdot(\overline{\mathbf{S}}_1 - \overline{\mathbf{S}}_2)\cdot\mathbf{n} = 0. \end{cases} \tag{3.24}$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal extérieur au domaine, et $\mathbf{t}$ est un vecteur tangent à l'interface.

$\sigma$ est la tension de surface et $\kappa$ est la courbure moyenne locale de l'interface donnée par : $\kappa = \nabla_s \cdot \mathbf{n}$, où $\nabla_s$ est la divergence surfacique.
Finalement, l'équilibre chimique des espèces à l'interface est gouverné par la continuité du flux diffusif de concentration et par un saut de concentration, exprimés par :

$$\begin{cases} D_1 \nabla C_{1,\Gamma} \cdot \mathbf{n}_1 = -D_2 \nabla C_{2,\Gamma} \cdot \mathbf{n}_2, \\ \mathrm{He}\, C_{1,\Gamma} = C_{2,\Gamma}. \end{cases} \tag{3.25}$$

où $C_{1,\Gamma}$ et $C_{2,\Gamma}$ désignent les concentrations évaluées sur l'interface $\Gamma$ du côté des phases 1 et 2, respectivement, et $\nabla C_{1,\Gamma}$ et $\nabla C_{2,\Gamma}$ leurs gradients correspondants. He est la constante de Henry, elle exprime la solubilité des espèces chimiques dans la phase liquide et permet également de donner la concentration du liquide à l'interface lorsque celui-ci est en équilibre thermodynamique avec la phase gazeuse.

## 3.2 Modèle à 1-fluide pour l'ensemble des équations de conservation

Comme expliqué précédemment, la formulation deux fluides consiste en la résolution des équations de conservation dans chacune des phases, avec une application de conditions de saut à l'interface pour la prise en compte des discontinuités. Cette approche permet une modélisation fine de l'écoulement, sans recours à des approximations au niveau de l'interface, en s'appuyant sur l'hypothèse de Gibbs, selon laquelle l'interface séparant les deux fluides a une épaisseur négligeable. Ainsi, le milieu continu perçoit cette interface comme une surface matérielle de discontinuité, ce qui garantit une représentation plus précise des propriétés interfaciales. Néanmoins, cette catégorie de modèles demeure relativement lourde sur le plan numérique du fait de la complexité de leur mise en œuvre. Notamment les complexités liées à l'utilisation d'un maillage mobile sur lequel sont résolues les équations de conservation, qui s'adapte en permanence à la déformation de l'interface, impliquant ainsi des exigences élevées en matière de traitement de l'interface. Pour pallier ces difficultés, une méthode dite à 1-fluide, offrant une mise en œuvre plus simple, ne requérant pas de maillage mobile, a été développée par Kataoka [86]. Il s'agit d'un modèle de mélange basé sur une formulation mono-fluide, dans laquelle la dynamique des deux phases ainsi que la transition à l'interface sont jumelées en un système d'équations unifié.

### 3.2.1 Transport de l'interface

Dans un écoulement diphasique, l'interface séparant les deux phases continues est définie par la fonction d'interface suivante :

$$f\left(\mathbf{x},t\right)=0 \tag{3.26}$$

avec :

$$f(\mathbf{x},t)=\begin{cases}>0 & \text{si } \mathbf{x}\in\Omega_1,\\ <0 & \text{si } \mathbf{x}\in\Omega_2.\end{cases} \tag{3.27}$$

Pour résoudre les équations de Navier-Stokes en mono-fluide, Kataoka [86] a introduit la fonction indicatrice de phase $\chi_p$, qui permet de localiser chaque phase, celle-ci est reliée à la fonction d'interface $f\left(\mathbf{x},t\right)$ comme suit :

$$\chi_p(\mathbf{x},t)=\begin{cases}H(f\left(\mathbf{x},t\right)) & \text{si } \mathbf{x}\in\Omega_p(t)\\ 1-H(f\left(\mathbf{x},t\right)) & \text{sinon}\end{cases} \tag{3.28}$$

avec $\Omega_p(t)$ le volume occupé par la phase $p$ au temps $t$ et $H(x)$ la fonction Heaviside définie par :

$$H(x)=\begin{cases}1 & \text{si } x>0,\\ 0 & \text{si } x<0.\end{cases} \tag{3.29}$$

Par conséquent, l'équation caractéristique de chaque phase $\chi_p$ devient :

$$\chi_p(\mathbf{x},t)=\begin{cases}1 & \text{si } \mathbf{x}\in\Omega_p(t)\\ 0 & \text{sinon}\end{cases} \tag{3.30}$$

L'équation d'advection de la fonction indicatrice de phase $\chi_p$ caractérisant le mouvement des fluides est donnée par (3.31).

$$\frac{\partial\chi_p}{\partial t}+\mathbf{u}_\Gamma\cdot\nabla\chi_p=0 \tag{3.31}$$

où $\boldsymbol{u}_\Gamma$ désigne la vitesse de l'interface. La dérivée partielle de la fonction $\chi$ satisfait les relations suivantes :

$$\frac{\partial\chi_p\left(\mathbf{x},t\right)}{\partial t}=\mathbf{u}_\Gamma\cdot\mathbf{n}_p\delta_\Gamma \tag{3.32}$$

$$\nabla\chi_p(\mathbf{x},t)=-\mathbf{n}_p\delta_\Gamma \tag{3.33}$$

avec $\delta_\Gamma$ la fonction Dirac distribuée à l'interface, $\mathbf{n}_p$ la normale extérieure de la phase $p$ à l'interface $\Gamma$, comme illustré dans la figure 3.2.

L'équation (3.33) traduit le fait que le gradient de la fraction volumique $\chi$, orienté selon la normale à l'interface $\mathbf{n}_p$, n'est non nul qu'au niveau de l'interface. En ce point, la variable $\chi_p$ passe brutalement de 1 à 0 dans la phase $p \in \{1, 2\}$, ce qui induit un gradient dirigé dans un sens opposé à la normale $\mathbf{n}_p$.

De plus, la fonction indicatrice de phase $\chi_p$ vérifie les propriétés suivantes, en tout point de l'écoulement et à tout instant :

$$\sum_{p=1}^{2} \chi_p(\mathbf{x}, t) = 1 \tag{3.34}$$

$$\chi_p^m = \chi_p, \quad p = 1, 2, \quad m > 0 \tag{3.35}$$

$$\chi_p \chi_\ell = 0, \quad p = 1, 2, \quad \ell = 1, 2, \quad p \neq \ell \tag{3.36}$$

En s'appuyant sur les définitions données en (3.35) et (3.36), il découle naturellement que le produit de toute grandeur diphasique $\chi_p A_p$ ou $\chi_p B_p$, qu'elle soit scalaire, vectorielle ou tensorielle, vérifie la relation suivante :

$$\sum_{p=1}^{2} \chi_p(\mathbf{x}, t) A_p \sum_{p=1}^{2} \chi_p(\mathbf{x}, t) B_p = \sum_{p=1}^{2} \chi_p(\mathbf{x}, t) A_p B_p \tag{3.37}$$

Pour établir les équations du modèle à 1-fluide, la fonction indicatrice de phase $\chi_p$ est multipliée par les équations de conservation du modèle à 2-fluides établies précédemment, à savoir la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et des espèces, données par (3.7), (3.13) et (3.21) respectivement. Ensuite, une sommation des équations finales sur les deux phases, en tenant compte des conditions à l'interface données en (3.23), (3.24) et (3.25), est effectuée pour aboutir à un système d'équations mono-fluide décrivant les deux phases, ainsi que les conditions à l'interface [108, 61]. Les propriétés de la fonction indicatrice de phase données ci-dessus sont utilisées pour simplifier les équations. Ainsi, le membre de gauche de l'équation (3.2) se développe :

$$\begin{aligned} \chi_p \left( \frac{\partial \Phi_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_p \Phi_p) \right) &= \left( \frac{\partial}{\partial t}(\chi_p \Phi_p) - \Phi_p \frac{\partial \chi_p}{\partial t} \right) + \nabla \cdot (\Phi_p \chi_p \mathbf{u}_p) - \Phi_p \mathbf{u}_p \nabla \chi_p \\ &= \left( \frac{\partial}{\partial t}(\chi_p \Phi_p) + \nabla \cdot (\mathbf{u}_p \Phi_p \chi_p) \right) - \Phi_p \left( \frac{\partial \chi_p}{\partial t} + \mathbf{u}_p \nabla \chi_p \right) \end{aligned} \tag{3.38}$$

et donne la relation suivante :

$$\chi_p \left( \frac{\partial \Phi_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_p \Phi_p) \right) = \frac{\partial}{\partial t}(\chi_p \Phi_p) + \nabla \cdot (\mathbf{u}_p \Phi_p \chi_p) - \Phi_p (\mathbf{u}_\Gamma - \mathbf{u}_p) \cdot \mathbf{n}_p \delta_\Gamma \tag{3.39}$$

De manière générale, la conservation de la grandeur $\Phi$ à la traversée de l'interface s'écrit sous la forme suivante :

$$\sum_{p=1,2} (\Phi_{Sp} \cdot \mathbf{n}_p + \Phi_p(\mathbf{u}_\Gamma - \mathbf{u}_p) \cdot \mathbf{n}_p) = 0 \tag{3.40}$$

avec $\Phi_{Sp}$ la contribution surfacique qui dépend de l'équation associée à la grandeur $\Phi_p$ considérée.

Les équations de bilan de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de la concentration des espèces dans un écoulement diphasique se caractérisent par la présence de deux ensembles de champs : $\rho_p$, $\mathbf{u}_p$, $p_p$, $C_p$, etc., pour chaque phase $p \in \{1, 2\}$. Cependant, l'établissement d'un formalisme à 1-fluide, nécessite l'introduction de variables uniques pour chaque grandeur, appelées variables de mélange. Ces variables de mélange sont définies en combinant les deux ensembles de champs correspondant aux phases, en utilisant une fonction indicatrice de phase pour pondérer chaque contribution.

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{p=1}^{2} \chi_p \rho_p \quad ; \quad \mu = \sum_{p=1}^{2} \chi_p \mu_p \\ \mathbf{u} &= \sum_{p=1}^{2} \chi_p \mathbf{u}_p \quad ; \quad \overline{\boldsymbol{\tau}} = \sum_{p=1}^{2} \chi_p \overline{\boldsymbol{\tau}}_p \\ p &= \sum_{p=1}^{2} \chi_p p_p \quad ; \quad C = \sum_{p=1}^{2} \chi_p C_p \end{aligned} \tag{3.41}$$

À partir du développement de l'équation générique, on dérive maintenant les équations de conservation du modèle à 1-fluide.

### 3.2.2 Conservation de la masse : $\Phi_p = \rho_p$

En sommant sur les phases et grâce au résultat de l'équation (3.39), on obtient :

$$\sum_{p=1}^{2} \chi_p \left( \frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_p \rho_p) \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{p=1}^{2} \chi_p \rho_p \right) + \nabla \cdot \left( \sum_{p=1}^{2} \rho_p \chi_p \mathbf{u}_p \right) - \sum_{p=1}^{2} \rho_p (\mathbf{u}_\Gamma - \mathbf{u}_p) \cdot \mathbf{n}_p \delta_\Gamma = 0. \tag{3.42}$$

Dans la phase $p \in \{1, 2\}$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{p=1}^{2} \chi_p \rho_p \right) + \nabla \cdot \left( \sum_{p=1}^{2} \rho_p \chi_p \mathbf{u}_p \right) = 0. \tag{3.43}$$

À l'interface :

$$-\sum_{p=1}^{2}\rho_p(\mathbf{u}_\Gamma-\mathbf{u}_p)\mathbf{n}_p\delta_\Gamma=0. \tag{3.44}$$

En tenant compte des variables de mélange définies par (3.41), ainsi que des relations de saut présentées dans la section précédente via (3.22), la formulation à 1-fluide du bilan de conservation de la masse s'écrit finalement :

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{u})=0 \tag{3.45}$$

### 3.2.3 Conservation de la quantité de mouvement : $\Phi_p=\rho_p\mathbf{u}_p$

En appliquant la même procédure que précédemment, la formulation à un fluide de l'équation du bilan de quantité de mouvement s'établit comme suit :

$$\sum_{p=1}^{2}\chi_p\left(\frac{\partial\rho_p\mathbf{u}_p}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho_p\mathbf{u}_p\otimes\mathbf{u}_p)\right)=\sum_{p=1}^{2}\chi_p\left(\nabla\cdot(\overline{\boldsymbol{S}}_p)+\rho_p\mathbf{g}\right). \tag{3.46}$$

Il vient,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{p=1}^{2}\rho_p\chi_p\mathbf{u}_p\right)+\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\rho_p\chi_p\mathbf{u}_p\otimes\mathbf{u}_p\right)-\sum_{p=1}^{2}\rho_p\mathbf{u}_p(\mathbf{u}_\Gamma-\mathbf{u}_p)\cdot\mathbf{n}_p\delta_I=\\ \nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p\overline{\boldsymbol{S}}_p\right)-\sum_{p=1}^{2}\overline{\boldsymbol{S}}_p\nabla\chi_p+\sum_{p=1}^{2}\chi_p\rho_p\mathbf{g}\end{aligned} \tag{3.47}$$

**Développement $\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p\overline{\boldsymbol{S}}_p\right)$**

$$\begin{aligned}\sum_{p=1}^{2}\chi_p\overline{\boldsymbol{S}}_p&=\sum_{p=1}^{2}\chi_p\left(-p_p\bar{\mathbf{I}}+\mu_p\left(\nabla\mathbf{u}_p+(\nabla\mathbf{u}_p)^\intercal\right)\right)\\&=\sum_{p=1}^{2}-\chi_p p_p\bar{\mathbf{I}}+\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mu_p\sum_{p=1}^{2}(\nabla(\chi_p\mathbf{u}_p)-\mathbf{u}_p\otimes\nabla\chi_p)+\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mu_p\sum_{p=1}^{2}(\nabla(\chi_p\mathbf{u}_p)^\intercal-\nabla\chi_p\otimes\mathbf{u}_p)\\&=\underbrace{\sum_{p=1}^{2}-\chi_p p_p\bar{\mathbf{I}}}_{-p\bar{\mathbf{I}}}+\underbrace{\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mu_p\sum_{p=1}^{2}\nabla(\chi_p\mathbf{u}_p)}_{\mu\nabla\mathbf{u}}+\underbrace{\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mu_p\sum_{p=1}^{2}\mathbf{n}_p\otimes\mu_p\delta_\Gamma}_{=0\text{ si }\mathbf{u}_1=\mathbf{u}_2\text{ et }\mathbf{n}_1=-\mathbf{n}_2}+\underbrace{\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mu_p\sum_{p=1}^{2}\nabla(\chi_p\mathbf{u}_p)^\intercal}_{\mu(\nabla\mathbf{u})^\intercal}\\&\quad+\underbrace{\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mu_p\sum_{p=1}^{2}\mathbf{n}_p\otimes\mathbf{u}_p\delta_\Gamma}_{=0}\end{aligned} \tag{3.48}$$

avec $\mu=\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mu_p$ la viscosité dynamique du mélange. En réarrangeant tous les termes, l'équation assemblée s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{p=1}^{2}\rho_p\chi_p\mathbf{u}_p\right)+\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\rho_p\chi_p\mathbf{u}_p\otimes\mathbf{u}_p\right)=$$
$$\sum_{p=1}^{2}-\chi_p p_p\bar{\mathbf{I}}+\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mu_p\sum_{p=1}^{2}\nabla(\chi_p\mathbf{u}_p)+\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mu_p\sum_{p=1}^{2}\nabla(\chi_p\mathbf{u}_p)^{\intercal}$$
$$+\sum_{p=1}^{2}\chi_p\rho_p\mathbf{g}+\sum_{p=1}^{2}\left(\overline{\boldsymbol{S}}_p+\rho_p\mathbf{u}_p(\mathbf{u}_\Gamma-\mathbf{u}_p)\right)\cdot\mathbf{n}_p\delta_\Gamma. \quad (3.49)$$

Dans chaque phase $p\in\{1,2\}$,

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{p=1}^{2}\rho_p\chi_p\mathbf{u}_p\right)+\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\rho_p\chi_p\mathbf{u}_p\otimes\mathbf{u}_p\right)=\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p\overline{\boldsymbol{S}}_p\right)+\sum_{p=1}^{2}\chi_p\rho_p\mathbf{g}. \quad (3.50)$$

À l'interface,

$$\sum_{p=1}^{2}\left(\overline{\boldsymbol{S}}_p+\rho_p\mathbf{u}_p(\mathbf{u}_\Gamma-\mathbf{u}_p)\right)\cdot\mathbf{n}_p\delta_\Gamma=\sigma\kappa\mathbf{n}_\Gamma\delta_\Gamma \quad (3.51)$$

Dans le modèle 1-fluide, les paramètres $\kappa$ et $\mathbf{n}$ modélisent les forces de tension de surface, ils représentent respectivement la courbure et la normale sortante à l'interface, et sont donnés par : $\kappa=-\nabla\cdot\mathbf{n}$,
À partir de la définition des variables de mélange (3.41) et des relations de saut établies par (3.22) et (3.24), l'équation du bilan de la quantité de mouvement pour le mélange s'exprime comme suit :

$$\frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u})=\nabla\cdot(\overline{\boldsymbol{\tau}})+\rho\mathbf{g}+\sigma\kappa\mathbf{n}_\Gamma\delta_\Gamma \quad (3.52)$$

### 3.2.4 Conservation des espèces : $\Phi_p = C_p$

Le formalisme du modèle 1-fluide du problème de diffusion est établi en s'appuyant sur les équations (3.21) et (3.25). En écrivant l'équation de conservation des espèces (3.21) pour chacune des phases $p\in\{1,2\}$ et en la multipliant par la fonction indicatrice de phase, nous avons :

$$\sum_{p=1}^{2}\chi_p\left(\frac{\partial C_p}{\partial t}+\nabla\cdot(\mathbf{u}_pC_p)\right)=\sum_{p=1}^{2}\chi_p\left(\nabla\cdot(-\mathbf{J}_p)\right) \quad (3.53)$$

En suivant la même démarche que celle adoptée précédemment, l'équation de conservation des espèces se développe comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p C_p\right)+\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mathbf{u}_p C_p\right)-\sum_{p=1}^{2}C_p(\mathbf{u}_\Gamma-\mathbf{u}_p)\cdot\mathbf{n}_p\delta_I= \nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p(-\mathbf{J}_p)\right)-\sum_{p=1}^{2}(-\mathbf{J}_p)\nabla\chi_p \quad (3.54)$$

Ici, on rappelle : $\mathbf{J}_p = -D_p\nabla C_p$. En réarrangeant tous les termes, l'équation assemblée s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p C_p\right)+\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p\mathbf{u}_p C_p\right)=\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p\nabla C_p\right)+\sum_{p=1}^{2}(D_p\nabla C_p+C_p(\mathbf{u}_\Gamma-\mathbf{u}_p))\cdot\mathbf{n}_p\delta_\Gamma \quad (3.55)$$

**Développement de $\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p\nabla C_p\right)$**

Le premier terme du second membre se réorganise et se développe comme suit :

$$\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p\nabla C_p=\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p\sum_{p=1}^{2}\chi_p\nabla C_p \quad =\underbrace{\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p\nabla(\sum_{p=1}^{2}\chi_p C_p)}_{D\nabla C}-\underbrace{\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p\sum_{p=1}^{2}C_p\nabla\chi_p}_{(\Gamma)} \quad (3.56)$$

Si une continuité de la variable de concentration $C$ est considérée à travers l'interface $C_2 = C_1 = C_\Gamma$, le terme $(\Gamma)$ s'annule. Toutefois, dans notre cas, la loi de solubilité de Henry impose un ratio de variable $C_2 = \mathrm{He}\, C_1$ au niveau de l'interface. Il advient donc :

$$\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p\sum_{p=1}^{2}C_p\nabla\chi_p=\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p(C_1\nabla\chi_1+C_2\nabla\chi_2) \quad (3.57)$$

Pour alléger l'écriture, on adopte la convention de marquer la phase liquide $\chi_1 = 1$, ce qui permet de simplifier les expressions en posant $\chi = \chi_1 = 1-\chi_2$. En exploitant la définition de la variable de mélange $C = \sum_{p=1}^{2}\chi_p C_p = \chi C_1 + (1-\chi)C_2$ combinée à la relation de saut :

$$\begin{aligned}\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p(C_1\nabla\chi_1+C_2\nabla\chi_2)&=\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p(C_1\nabla\chi-\mathrm{He}C_1\nabla\chi)\\&=D(1-\mathrm{He})C_1\nabla\chi\\&=\frac{D(1-\mathrm{He})C\nabla\chi}{(1-\chi)\mathrm{He}+\chi}\end{aligned} \quad (3.58)$$

L'équation assemblée s'écrit donc :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p C_p\right)+\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p \mathbf{u}_p C_p\right)=\nabla\cdot\left(\sum_{p=1}^{2}\chi_p D_p\nabla(\sum_{p=1}^{2}\chi_p C_p)-\frac{D(1-\mathrm{He})C\nabla\chi}{(1-\chi)\mathrm{He}+\chi}\right)+\sum_{p=1}^{2}(D_p\nabla C_p+C_p(\mathbf{u}_\Gamma-\mathbf{u}_p))\cdot\mathbf{n}_p\delta_\Gamma \tag{3.59}$$

En s'appuyant sur la définition des variables de mélange (3.41) et sur les relations décrivant l'équilibre chimique des espèces à l'interface, données par (3.25), l'équation de concentration des espèces dans le formalisme à un fluide s'écrit :

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\nabla\cdot(\mathbf{u}C)=\nabla\cdot(D\nabla C-\mathbf{\Psi}) \tag{3.60}$$

$\mathbf{\Psi}=\frac{D(1-\mathrm{He})C}{(1-\chi)\mathrm{He}+\chi}\nabla\chi$ représente un terme source additionnel associé au saut de concentration à l'interface, où $D$ est le coefficient de diffusion effectif moyen.

### 3.2.5 Filtrage des équations du formalisme à 1-fluide

Du fait de la discontinuité de la fonction $\chi_p$ à l'interface (3.30), les équations mono-fluide obtenues ne peuvent pas être utilisées sans l'application d'un filtre spatial. Celui-ci permet d'établir une continuité entre les deux phases à l'interface en lissant les discontinuités induites par la fonction $\chi_p$. Ainsi, les deux phases sont détectées via la fraction volumique $\alpha_p(x,t)$, qui reflète le taux de présence de la phase $p$ autour d'un point $\mathbf{x}$ à un instant donné $t$. L'application du filtre spatial $G(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ à la fonction $\chi_p$ est réalisée comme suit :

$$\overline{\chi}_p=\alpha_p(\mathbf{x},t)=\int_V \chi_p(\mathbf{x},t)G(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\mathrm{d}x' \tag{3.61}$$

où $V$ représente le volume du filtre spatial, généralement de l'ordre de la taille de la maille, et $\overline{\chi_p}$ désigne la quantité filtrée de la fonction indicatrice de phase $\chi_p$. L'application du filtre à $\chi_p$ conduit à la fraction volumique $\alpha_p$ de la phase $p$ dans le volume $V$.

En utilisant ce principe de filtrage spatial, toutes les grandeurs qui interviennent dans le système d'équations à résoudre, telles que $\rho_p, \mu_p, \mathbf{u}_p$ *et* $\overline{\mathbf{S}}_p$, sont filtrées pour déterminer leurs moyennes locales. En posant $\Psi_p=\{\rho_p,\mu_p,\mathbf{u}_p,\overline{\mathbf{S}}_p\}$, l'application du filtre $G(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ à $\Psi_p$ revient à l'équation (3.62).

$$\alpha_p(\mathbf{x},t)\tilde{\Phi}_p(\mathbf{x},t)=\int_V \chi_p(\mathbf{x},t)\Phi(\mathbf{x}',t)G(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\mathrm{d}x' \tag{3.62}$$

$\Phi_p$ pouvant être une des grandeurs $\rho_p, \mu_p, \mathbf{u}_p, C_p$, et $\tilde{\Phi}_p$ est le résultat du filtrage spatial de ces grandeurs. Les moyennes des grandeurs filtrées $\tilde{\rho}_p, \tilde{\mu}_p, \tilde{\mathbf{u}}_p, \tilde{C}_p$ représentent les variables du mélange dans les mailles coupées par l'interface, elles sont données en fonction de la fraction volumique $\alpha_p$ suivant l'équation (3.63).

$$\tilde{\phi}(\mathbf{x}, t) = \sum_{p=1}^{2} \alpha_p(\mathbf{x}, t)\tilde{\Phi}_p \tag{3.63}$$

où $\tilde{\phi}(\mathbf{x}, t)$ désigne la variable de mélange filtrée de chaque grandeur : $\tilde{\rho}_p(\mathbf{x}, t)$, $\tilde{\mu}_p(\mathbf{x}, t)$, $\tilde{\mathbf{u}}_p(\mathbf{x}, t)$, $\tilde{C}_p(\mathbf{x}, t)$.

L'application du filtre spatial aux équations établies en (3.45) et (3.52) donne les équations de masse et de quantité de mouvement du modèle 1-fluide sans présence d'aucune discontinuité :

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0 \tag{3.64}$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}\tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\tilde{\rho}\tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}}\right) = \tilde{\rho}\mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot \tilde{\bar{\boldsymbol{\tau}}} + \sigma\kappa\mathbf{n}\delta_\Gamma \tag{3.65}$$

L'équation d'advection de la fraction volumique $\alpha$ du formalisme monofluide est donnée par (3.66)

$$\frac{\partial \alpha_p}{\partial t} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \alpha_p = 0 \tag{3.66}$$

L'équation de conservation des espèces du modèle 1-fluide est obtenue après l'application du filtre spatial à l'équation phasique établie en (3.21). Ainsi :

$$\frac{\partial \tilde{C}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\tilde{\mathbf{u}}\tilde{C}\right) = \nabla \cdot \left(\langle D \rangle_h \nabla \tilde{C} - \tilde{\boldsymbol{\Psi}}\right), \tag{3.67}$$

avec :

$$\tilde{\boldsymbol{\Psi}} = \langle D \rangle_h \frac{\tilde{C}\,(1 - \mathrm{He})}{(\alpha + [1 - \alpha]\,\mathrm{He})} \nabla \alpha \tag{3.68}$$

Où $\langle D \rangle_h$ représente le coefficient de diffusivité effectif, exprimé par une moyenne harmonique, comme il a été démontré dans les travaux de Deising, Marschall et Bothe [38] :

$$\langle D \rangle_h \equiv \frac{D_1 D_2}{\alpha D_2 + (1 - \alpha)\, D_1}. \tag{3.69}$$

Pour alléger l'écriture, le symbole $\tilde{}$ faisant référence au filtrage spatial des variables du problème ne sera pas affiché dans les équations, le modèle 1 fluide est alors donné direc-

tement par :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{3.70}$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha = 0 \tag{3.71}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} \right) = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot \overline{\boldsymbol{\tau}} + \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_I \tag{3.72}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} C) = \nabla \cdot \left[ \langle D \rangle_h \nabla C - \langle D \rangle_h \frac{C\,(1 - \mathrm{He})}{(\alpha + [1 - \alpha]\,\mathrm{He})} \nabla \alpha \right], \tag{3.73}$$

Ainsi, en formulation 1-fluide, un seul système d'équations offre la possibilité de décrire la dynamique des deux phases ainsi que celle de l'interface. Ce type d'approche présente l'avantage d'être relativement simple à mettre en œuvre, en permettant la résolution du système d'équations sur une grille eulérienne fixe. Elle permet ainsi de s'affranchir des complexités associées à l'utilisation de maillages mobiles, notamment pour le suivi des déformations de l'interface. Il est tout de même nécessaire de localiser l'interface afin de déterminer sa position ainsi que sa forme au cours du temps lorsque les fluides sont en mouvement. En effet, comme illustré par les équations du modèle mono-fluide, les propriétés physiques telles que la densité et la viscosité sont fixes dans les phases, mais varient dans les mailles traversées par l'interface. Il est donc primordial d'avoir la position de l'interface pour calculer les propriétés du mélange dans ces mailles, ainsi que de déterminer les quantités interfaciales telles que la courbure et la normale à l'interface durant le processus de déformation de celle-ci. Ceci est réalisé à travers différentes méthodes qui sont présentées en section 5 du suivant chapitre 4 sur les méthodes numériques.

CHAPITRE 4

# Méthodes numériques pour la modélisation de transferts aux interfaces

## Structure du chapitre


4.1 Méthodes de localisation d'interface . . . . . 85
4.1.1 Méthode Volume of Fluid (VOF) pour la capture d'interface . . . . 87
4.1.1.1 Reconstruction géométrique d'interface . . . . . 88
4.1.1.2 Advection géométrique d'interface . . . . . 91
4.2 Résolution numérique du transfert de masse à travers des interfaces résolues 94
4.2.1 Discrétisation temporelle du formalisme de mélange des équations de Navier-Stokes . . . . . 94
4.2.2 Discrétisation spatiale des équations du modèle 1-fluide : méthode des Volumes Finis (VF) . . . . . 94
4.2.2.1 Discrétisation des équations de Navier-Stokes . . . . . 95
4.2.2.2 Discrétisation de l'équation de concentration des espèces . 98
4.2.3 Traitement des conditions aux limites . . . . . 100
4.2.4 Solveur de résolution des équations de conservation . . . . . 101
4.2.5 Test de validation de l'équation de diffusion stationnaire 1D dans une formulation à 1-fluide . . . . . 103

## 4.1 Méthodes de localisation d'interface

La principale caractéristique des écoulements polyphasiques, impliquant deux ou plusieurs phases simultanément, est la présence d'une interface commune séparant les différents fluides en interaction. À travers cette interface, les propriétés physiques de chaque phase subissent un changement brusque appelé "saut de variable", comme décrit à la section 3.1 du chapitre précédent. Une bonne représentation de cette interface est, par conséquent, un élément crucial pour la précision des simulations. De ce fait, la localisation, la reconstruction et le transport de cette dernière ont fait l'objet de nombreuses investigations numériques. Pour localiser l'interface, deux grandes catégories de méthodes sont utilisées et documentées dans la littérature :

— **Les méthodes de suivi d'interface :** Ces méthodes reposent sur un maillage lagrangien dédié à l'interface, qui s'adapte dynamiquement à son mouvement. Elles permettent ainsi de suivre explicitement l'évolution de l'interface au cours du temps, notamment sa position et sa forme. Cela est réalisé par le déplacement de marqueurs mobiles positionnés préalablement sur l'interface, comme illustré sur la figure 4.1c. Le transport de ces marqueurs requiert une interpolation des vitesses d'écoulement, calculées sur une grille eulérienne fixe où les équations de conservation sont résolues. La méthode de suivi d'interface connue sous le nom de Front-Tracking (FT), appellation introduite initialement par Richtmyer et Morton [127], trouve ses fondements et ses premières applications dans les travaux de [62, 63, 83, 162]. Selon la manière dont l'interaction entre la grille eulérienne et le maillage lagrangien est gérée, différentes variantes de la méthode FT peuvent être distinguées. De façon générale, toutes ces approches recourent à des maillages triangulaires non structurés pour représenter l'interface, ce qui permet de prendre en compte les changements de topologie (coalescence, fragmentation) en ajoutant ou en supprimant des éléments.

  Cette approche se distingue par sa robustesse dans le suivi de l'interface, aussi bien à grande échelle qu'à l'échelle sous-maille, et permet une estimation satisfaisante de ses propriétés géométriques, telles que la normale et la courbure. Néanmoins, elle présente la limitation majeure de ne pas garantir la conservation du volume. Par ailleurs, la procédure de déplacement des marqueurs requiert des opérations régulières de remaillage afin de les repositionner correctement et d'assurer une qualité de maillage satisfaisante au niveau de l'interface. Cette exigence est essentielle pour préserver une représentation géométrique cohérente, mais elle alourdit la méthode FT, la rendant complexe et coûteuse, notamment dans les situations impliquant des changements topologiques importants, comme la coalescence ou la rupture.

— **Les méthodes de capture d'interface :** à la différence des méthodes de suivi explicite, qui reposent sur le déplacement de marqueurs situés à l'interface entre les fluides, les méthodes de capture d'interface consistent à advecter une fonction indicatrice de phase. La position de l'interface est alors reconstruite au sein de chaque cellule du maillage eulérien, permettant de suivre ses mouvements et déformations. Parmi les principales méthodes de cette catégorie, nous citons, la méthode *Volume Of Fluid* (VOF) détaillée dans la section 4.1.1 et la méthode *Level-Set*.

La méthode Level-Set a été élaborée par Osher et Sethian [116], elle consiste à capturer l'interface grâce à une fonction distance $\phi(\mathbf{x}, t)$ qui vaut 0 à l'interface $\Gamma$, et prend des valeurs positives et négatives en s'éloignant de celle-ci, selon la phase dans laquelle elle se situe, comme illustré sur la figure 4.1 b. La fonction $\phi$ peut être définie par :

$$\phi(\mathbf{x}, t) \begin{cases} = 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Gamma, \\ < 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_1, \\ > 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_2. \end{cases} \tag{4.1}$$

Suivant le signe et la valeur de la fonction distance $\phi(\mathbf{x}, t)$ au sein d'une maille, il est simple de déterminer la phase ainsi que la distance à l'interface. Le transport de l'interface se fait par la résolution de l'équation d'advection de la fonction $\phi$ donnée par :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\, \phi = 0 \tag{4.2}$$

Du fait de la continuité de la fonction distance, la résolution numérique de l'équation d'advection peut être effectuée sans recourir à une reconstruction géométrique. Les paramètres géométriques de l'interface, tels que la courbure et la normale, sont ainsi déterminés de manière simple et efficace. Cependant, il convient de souligner que si la fonction $\phi$ est simplement advectée par le fluide, toute déformation de l'interface entraîne une variation de son gradient. Par conséquent, après chaque advection, $\phi$ doit être réinitialisée afin de rester une fonction signée vérifiant la condition $\|\nabla\phi\|_2 = 1$, ce qui garantit que $\phi$ conserve la même forme au voisinage de l'interface à tout instant. Cette procédure de réinitialisation, introduite par Sussman, Smereka et Osher [148], consiste à modifier $\phi$ en résolvant, à chaque pas de temps, une équation appropriée qui impose une pente constante près de l'interface. Néanmoins, cette opération peut engendrer un déplacement artificiel de l'interface, compromettant ainsi la conservation de la masse, ce qui constitue le talon d'Achille de la méthode *Level-Set* [159].

De nombreuses améliorations ont été proposées pour remédier à ce problème de conservation de masse. Parmi les plus notables :

— Sussman et al. [149], qui ont proposé une amélioration spécifique de la conservation de masse.

— La méthode hybride *Coupled Level-Set/Volume-of-Fluid* (CLSVOF), développée par Sussman et Puckett [150], qui combine la capacité de la méthode VOF à conserver la masse avec la précision du calcul de la normale et de la courbure de l'interface offerte par la méthode *Level-Set*.

— La méthode *Conservative Level-Set* d'Olsson et Kreiss [115]. et enfin, La méthode *Accurate Conservative Level-Set*, proposée par Desjardins, Moureau et Pitsch [40].

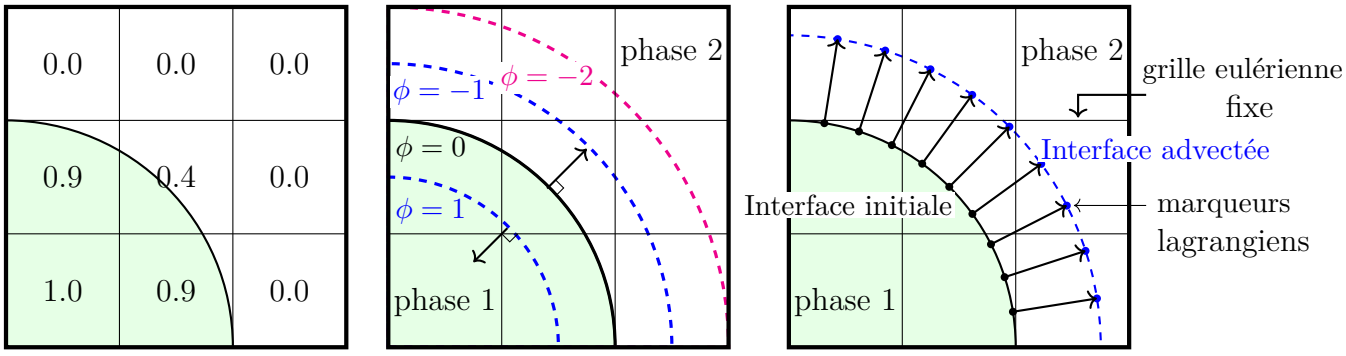



Figure 4.1 – Comparaison schématique des principales méthodes numériques de localisation d'interface : (a) distribution de la fraction volumique dans le modèle VOF, (b) fonction distance utilisée en méthode Level-Set, (c) marqueurs lagrangiens mobiles de la méthode Front-Tracking.

### 4.1.1 Méthode Volume of Fluid (VOF) pour la capture d'interface

La méthode VOF est une approche eulérienne mise au point par Hirt et Nichols [74] qui repose sur le principe de l'advection d'un champ scalaire appelé fonction couleur pour prendre en compte, par une variable volumique, la présence d'une interface. Ainsi, cette fonction permet de connaître, au cours du temps, le taux de chaque phase au sein d'une maille, en représentant directement la fraction volumique du fluide présent dans la cellule du maillage. De ce fait, la fonction couleur vaut 0 ou 1 dans les mailles où il y a uniquement présence d'une des phases, et a des valeurs intermédiaires dans les cellules traversées par l'interface, synonyme de l'existence d'un mélange de deux fluides,

que l'on appelle cellules mixtes. Le principal avantage de cette méthode est d'assurer naturellement la conservation du volume si les schémas numériques sont bien choisis. Le suivi de la déformation de l'interface se fait à travers l'advection de la fonction couleur $\alpha$ suivant l'équation :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\, \alpha = 0 \tag{4.3}$$

La fonction couleur $\alpha$ nous donne uniquement une information sur le taux de présence dans chaque maille. L'équation (4.3) peut être résolue à l'aide de deux catégories de méthodes : les *méthodes algébriques* et *les méthodes géométriques*. Les méthodes algébriques reposent principalement sur des interpolations issues des schémas de discrétisation standards pour estimer la fraction volumique à chaque instant [165]. Simples à mettre en œuvre et peu coûteuses en calcul, elles présentent toutefois une précision limitée, notamment pour les géométries complexes. Elles sont également sensibles à la diffusion numérique, ce qui entraîne un étalement non physique de la zone de mélange interfaciale et des erreurs de conservation de volume. Les méthodes géométriques, quant à elles, consistent à reconstruire l'interface à partir du taux de présence dans les mailles, puis à la transporter. Ce processus s'articule autour de deux étapes principales, détaillées ci-après. Bien que plus complexes, ces méthodes offrent une meilleure gestion des interfaces complexes, réduisent les erreurs de diffusion numérique et produisent des résultats plus précis. C'est pourquoi la reconstruction géométrique est privilégiée pour répondre aux exigences de ce travail.

— **La reconstruction des interfaces :** Cette étape vise à reconstituer la forme et l'orientation de l'interface dans chaque cellule de la grille de calcul à partir de l'évaluation de la fraction volumique $\alpha$ de chaque fluide dans les mailles. La reconstruction s'appuie sur des informations géométriques dérivées de cette fraction afin de représenter explicitement l'interface par des segments linéaires (en 2D) ou par des plans (en 3D). Parmi les méthodes de reconstruction géométrique utilisées dans le cadre de la méthode VOF, on distingue notamment les approches VOF-SLIC et VOF-PLIC, qui seront détaillées ci-après.

— **Le transport des interfaces construites :** une fois l'interface construite, elle est advectée dans le domaine de calcul en accord avec le champ de vitesse. Ce processus consiste à déterminer, pour chaque instant suivant, la position de l'interface et le taux de présence associé dans chaque cellule du maillage. L'objectif principal est de capturer fidèlement le déplacement de l'interface tout en préservant des propriétés physiques, comme la conservation de la masse et la cohérence géométrique.

#### 4.1.1.1 Reconstruction géométrique d'interface

La résolution des équations de Navier-Stokes décrivant un écoulement diphasique, caractérisé par la présence d'une interface entre deux fluides, nécessite une reconstruction précise

de cette interface dans les cellules du domaine de calcul. Cette précision est essentielle pour garantir la précision des résultats et assurer une bonne représentation des propriétés physiques des fluides à proximité de l'interface, en particulier dans les simulations où celle-ci est souvent dynamique, non linéaire et complexe. Par ailleurs, l'étalement de l'interface sur plusieurs mailles, induit par les méthodes algébriques, peut entraîner des problèmes d'instabilité numérique et provoquer des oscillations non physiques, compromettant ainsi la convergence de la solution. Afin de pallier ce problème, une reconstruction géométrique de l'interface est effectuée avant l'advection de la fonction couleur. L'objectif est de localiser précisément l'interface, permettant ainsi une meilleure représentation des propriétés physiques des fluides et une plus grande fidélité des résultats.

De manière générale, deux méthodes principales sont utilisées pour la reconstruction géométrique de l'interface dans l'approche VOF : la méthode SLIC (Simple Line Interface Calculation) et la méthode PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation). Ces deux méthodes visent à déterminer avec plus de précision la position de l'interface, en tenant compte de la géométrie locale du maillage et des fractions volumiques des fluides dans les cellules.




FIGURE 4.2 – Illustration des reconstructions géométriques : VOF-SLIC et VOF-PLIC.

**Simple Line Interface Calculation (SLIC)** Proposée par NOH et WOODWARD [114], la méthode SLIC représente l'interface par des segments parallèles aux axes du maillage, comme illustré en figure 4.2. L'orientation, horizontale ou verticale, est déterminée par la direction où la fonction couleur $\alpha$ présente la plus forte variation : le segment est donc aligné avec l'axe du gradient maximal. La reconstruction s'effectue en deux étapes : d'abord, les cellules pour lesquelles $0 < \alpha < 1$ sont identifiées comme étant partiellement remplies et donc traversées par l'interface. Ensuite, dans chaque cellule diphasique repérée, un segment horizontal ou vertical est positionné de manière à respecter la fraction volumique $\alpha$. Bien que relativement simple et rapide à implémenter, cette méthode présente plusieurs

limitations. Elle est peu adaptée pour représenter des interfaces complexes ou fortement courbées, car elle néglige l'inclinaison réelle de l'interface. De plus, cette méthode peut entraîner des erreurs significatives lorsque les interfaces sont dynamiques ou présentent des géométries non rectilignes. Pour cette raison, celle-ci constitue plus une approche historique, principalement utilisée à des fins pédagogiques ou dans des cas académiques simples.

**Piecewise Linear Interface Calculation (PLIC)** Initialement introduite par DeBar [35] et Youngs [174], cette méthode constitue une amélioration de l'approche SLIC en permettant une représentation plus réaliste des interfaces. Elle repose sur le même principe de reconstruction d'interface à travers l'utilisation de segments linéaires (en 2D) ou des plans (en 3D), dont l'orientation n'est pas contrainte, elle n'est plus forcément parallèle à la grille eulérienne, contrairement à la SLIC, offrant ainsi une représentation plus fidèle des interfaces, comme illustrée en figure 4.2. L'algorithme de reconstruction d'interface par la méthode PLIC comporte trois principales étapes : la détermination du degré d'inclinaison des segments ainsi que leur orientation à travers l'approximation de la normale à l'interface $\mathbf{n}$ dans chaque cellule. Une fois la position et l'orientation des segments déterminées, l'étape suivante consiste à placer les segments de manière à respecter la fraction volumique $\alpha$ de la cellule, garantissant ainsi une bonne conservation de la masse. Cette méthode est plus complexe et nécessite davantage de calculs géométriques, mais elle offre une meilleure précision pour les interfaces non linéaires et réduit les erreurs de diffusion, en particulier pour les interfaces qui sont fortement courbées.

De plus, pour la méthode PLIC, et d'après la description de Youngs [174], la normale à l'interface est estimée à partir du gradient de la fraction volumique, $\mathbf{n} = \nabla\alpha$, obtenu à partir des valeurs de fraction volumique dans un bloc de cellules $3 \times 3$ centré sur la cellule d'intérêt (en 2D). D'autres méthodes, moins répandues mais d'ordre plus élevé, ont également été proposées pour le calcul des normales, telles que la méthode LVIRA (Least-squares Volume-of-Fluid Interface Reconstruction Algorithm) et sa version optimisée ELVIRA (Efficient Least-squares Volume-of-Fluid Interface Reconstruction Algorithm), introduites par Pilliod et Puckett [117], Puckett [122]. Ces approches reposent sur une régression aux moindres carrés appliquée à un voisinage de cellules interfaciales. Elles permettent une estimation plus précise de l'orientation de l'interface, notamment dans les zones de forte courbure, en minimisant l'erreur en norme $\|E\|_2$ entre la fraction volumique dans la maille et l'interface reconstruite lors de l'évaluation de la pente du segment.

Pour notre application, la méthode de reconstruction géométrique PLIC est retenue en

raison de sa capacité à préserver avec précision les propriétés géométriques de l'interface. Cette méthode est particulièrement performante pour représenter des interfaces courbes et complexes, ce qui la rend parfaitement adaptée aux exigences de nos simulations, dans lesquelles une haute fidélité dans la représentation des interfaces est requise.

#### 4.1.1.2 Advection géométrique d'interface

La précision de la résolution des équations dans le modèle à un fluide (VOF) dépend d'une localisation exacte de l'interface. Par conséquent, un transport précis de cette dernière est essentiel. Plusieurs méthodes d'advection de l'interface existent pour répondre à cette exigence. Dans les méthodes PLIC, une fois l'interface construite, son advection peut être réalisée en s'appuyant sur l'une des deux grandes catégories de méthodes d'advection basées sur un splitting directionnel. La première catégorie comprend les méthodes géométriques, qui consistent à transporter les points d'extrémité de chaque segment de l'interface en suivant le champ de vitesse. La seconde catégorie regroupe les méthodes de flux, telles que l'algorithme de Weymouth et Yue [172], qui sont les plus couramment utilisées dans la communauté. Ces méthodes estiment le flux de fluide traversant les faces de chaque maille, permettant ainsi de déterminer la position mise à jour de l'interface en fonction de la variation du taux de présence des phases dans chaque cellule du maillage.

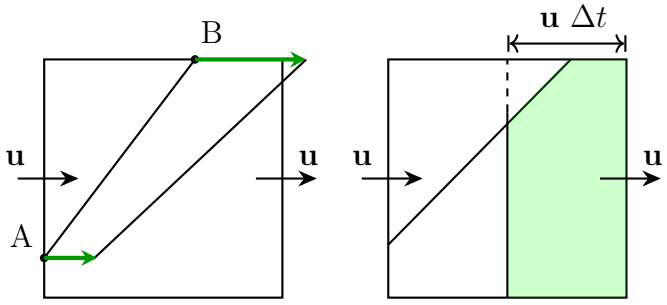



Figure 4.3 – Illustration de méthodes géométriques d'advection de l'interface

La méthode des flux de Weymouth et Yue [172] a été sélectionnée pour notre étude en raison de sa robustesse et de ses propriétés essentielles, notamment la conservation de la masse, qu'elle assure lors du suivi des interfaces. Cette méthode sera détaillée ci-après.

**Méthode des flux : (algorithme de Weymouth et Yue [172])** Après la reconstruction de l'interface, l'étape suivante consiste à transporter chaque portion de celle-ci dans les trois directions $x, y, z$ de manière successive, en se basant sur l'estimation des bilans des flux géométriques du fluide entrant et sortant de chaque cellule $i, j, k$ conte-

nant l'interface (les flux qui traversent les faces de chaque maille). Dans cette approche, on traite l'équation de la fonction couleur $\alpha$ donnée en (4.4), introduite par Rider et Kothe [128], dans laquelle un terme supplémentaire de divergence est à considérer. À partir (4.3) et $\nabla \cdot (\mathbf{v}\alpha) = (\mathbf{u} \cdot \nabla)\,\alpha + \alpha \nabla \cdot \mathbf{u}$, on peut écrire :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\alpha) = \alpha \nabla \cdot \mathbf{u} \tag{4.4}$$

Dans l'algorithme de Weymouth et Yue [172], le terme additionnel du second membre, également appelé coefficient de compression, est formulé de manière binarisée et indépendante de la direction, afin de garantir une conservation stricte de la masse à la précision machine, selon l'expression suivante :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\alpha) = \tilde{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{u} \tag{4.5}$$

avec :

$$\tilde{\alpha} = \begin{cases} 1 & si \quad \alpha > 0.5 \\ 0 & si \quad \alpha < 0.5 \end{cases} \tag{4.6}$$

L'intégration spatio-temporelle de cette équation dans une maille est donnée par :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_\Omega \alpha \, \mathrm{d}V \; + \; \int_{\partial\Omega} \alpha \, \boldsymbol{u} \cdot \mathbf{n} \, \mathrm{d}S \; = \; \int_\Omega \tilde{\alpha} \, \nabla \cdot \boldsymbol{u} \, \mathrm{d}V \tag{4.7}$$

il vient,

$$\Delta\alpha \frac{\Delta V}{\Delta t} + F_{NET} = \int_\Omega \tilde{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{u} \; \mathrm{d}V \tag{4.8}$$

où $F_{NET}$ représente le bilan de flux dans le volume $\Omega$.

Comme mentionné dans la section 4.1.1.2, cette méthode d'advection d'interface repose sur une approche de splitting directionnel. Concrètement, le problème de transport décrit par l'équation (4.8) est décomposé, sur un pas de temps $\Delta t$ donné, en une série de sous-résolutions successives suivant chacune des directions spatiales. Pour un écoulement en 2D, cela signifie que le transport est résolu séquentiellement selon les directions $x$ et $y$ :

$$\Delta\alpha \frac{\Delta V}{\Delta t} = \Delta_{\mathbb{I}} F_{\mathbb{I}} + \int_\Omega \tilde{\alpha} \frac{\partial u_{\mathbb{I}}}{\partial \mathbb{I}} \; \mathrm{d}V \qquad \text{pour} \quad \mathbb{I} = x, y \tag{4.9}$$

$\mathbb{I}$ étant la direction de l'espace considérée et $\Delta_{\mathbb{I}} F_{\mathbb{I}}$ le bilan du flux net de la fraction volumique $\alpha$ à travers les faces des cellules du maillage. L'écriture discrète de la forme

générale donnée par (4.9) est effectuée en 2D, direction par direction, comme suit :

$$[\alpha_{i,j}^{',n+1} - \alpha_{i,j}^{n}]\frac{\Delta V}{\Delta t} = F_{i+\frac{1}{2},j} - F_{i-\frac{1}{2},j} + \int_{\Omega} \tilde{\alpha}\frac{\partial u}{\partial x}\,\mathrm{d}V \tag{4.10}$$

$$[\alpha_{i,j}^{'',n+1} - \alpha_{i,j}^{',n+1}]\frac{\Delta V}{\Delta t} = F_{i,j+\frac{1}{2}} - F_{i,j-\frac{1}{2}} + \int_{\Omega} \tilde{\alpha}\frac{\partial v}{\partial y}\,\mathrm{d}V \tag{4.11}$$

Un problème typique d'advection en deux dimensions est illustré dans la figure ci-dessous :

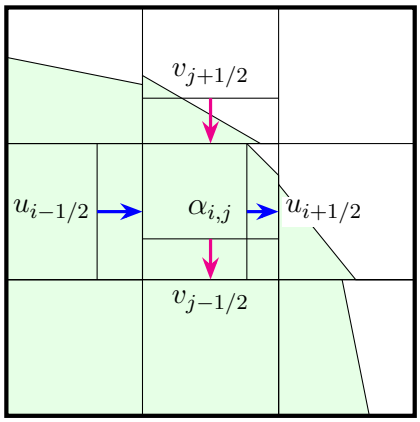



FIGURE 4.4 – Advection de la fraction volumique par évaluation des flux

Parmi les différentes méthodes de localisation d'interface abordées dans la littérature et décrites précédemment, la méthode VOF a été retenue pour ce travail. Bien que les autres méthodes de capture et de suivi d'interface offrent chacune des atouts spécifiques, la méthode VOF se distingue par sa capacité à assurer la conservation de la masse, ainsi que par son efficacité à gérer les interfaces complexes dans des simulations diphasiques. Ces avantages, combinés à sa simplicité relative de mise en œuvre, en font un choix particulièrement adapté à cette étude.

## 4.2 Résolution numérique du transfert de masse à travers des interfaces résolues

Tous les modèles mathématiques et méthodes numériques présentés dans ce travail sont implémentés et validés au sein du code de recherche FUGU, développé au laboratoire de Modélisation et Simulation Multi-Échelles (MSME) par l'équipe Transfert de Chaleur et de Masse (TCM). Ce code est basé sur la méthode des volumes finis et est dédié à la simulation d'écoulements polyphasiques et en milieux hétérogènes, pour des fluides incompressibles et compressibles. Il intègre des approches eulériennes adaptées aux interfaces résolues, telles que les méthodes VOF (Volume of Fluid), Level-Set et Front-Tracking, offrant ainsi une grande flexibilité pour capturer et modéliser les dynamiques complexes des interfaces.

### 4.2.1 Discrétisation temporelle du formalisme de mélange des équations de Navier-Stokes

Les équations du modèle mathématique à 1-fluide décrites dans le chapitre précédent doivent être intégrées en temps avant d'être discrétisées spatialement. Dans le cadre de ce travail, toutes les intégrations temporelles sont effectuées à l'aide d'un schéma dont l'expression générale, appliquée à un champ quelconque $\zeta$, s'écrit comme suit :

$$\int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial \zeta^{n+1}}{\partial t} \mathrm{d}V \simeq \int_{\Omega_{i,j}} \frac{a_1 \zeta^{n+1} + a_2 \zeta^{n} + a_3 \zeta^{n-1}}{\Delta t} \mathrm{d}V \tag{4.12}$$

où $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ est le pas de temps de la simulation, c'est un paramètre qui doit être correctement choisi pour assurer une bonne approximation des résultats. Les coefficients $a_k$, pour $k = 1, 2, 3$, dépendent de l'ordre du schéma temporel adopté. Dans le cas d'un schéma d'ordre 1, utilisé dans le présent travail, ces coefficients prennent les valeurs suivantes : $a_1 = 1$, $a_2 = -1$, $a_3 = 0$. En revanche, pour un schéma d'ordre 2, ils valent respectivement $a_1 = \frac{3}{2}$, $a_2 = -2$, et $a_3 = \frac{1}{2}$.

### 4.2.2 Discrétisation spatiale des équations du modèle 1-fluide : méthode des Volumes Finis (VF)

L'ensemble des équations du bilan issues du modèle 1-fluide présenté précédemment (3.70), (3.72) et (3.73) peuvent être spatialement intégrées à l'aide des différentes méthodes de discrétisation numériques, à savoir la méthode des éléments finis, la méthode des différences finies, la méthode spectrale ou encore la méthode des volumes finis. Cette dernière

est utilisée dans le cadre de ce travail en raison des avantages numériques qu'elle offre. En effet, en plus d'être particulièrement robuste pour les écoulements présentant des discontinuités, elle est facilement adaptable aux géométries complexes, tout en permettant d'assurer la conservation des flux entre les cellules. Ce dernier avantage est d'une importance majeure, car il permet d'assurer une certaine précision dans les simulations.

L'idée directrice de la méthode des volumes finis (VF) consiste à intégrer les équations différentielles gouvernant l'écoulement sur chaque volume de contrôle. Pour ce faire, une grille décalée, initialement introduite par Harlow et Welch [70] dans le cadre de la méthode Marker-And-Cell (MAC), est adoptée. Elle consiste à représenter le domaine de calcul par une grille cartésienne structurée, sur laquelle les variables discrètes de vitesses et des champs scalaires sont positionnées de manière décalée. Les composantes de vitesse sont localisées aux centres des faces délimitant les volumes de contrôle $\Omega_{i,j}$ centrés sur les nœuds scalaires, comme illustré en figure 4.5.

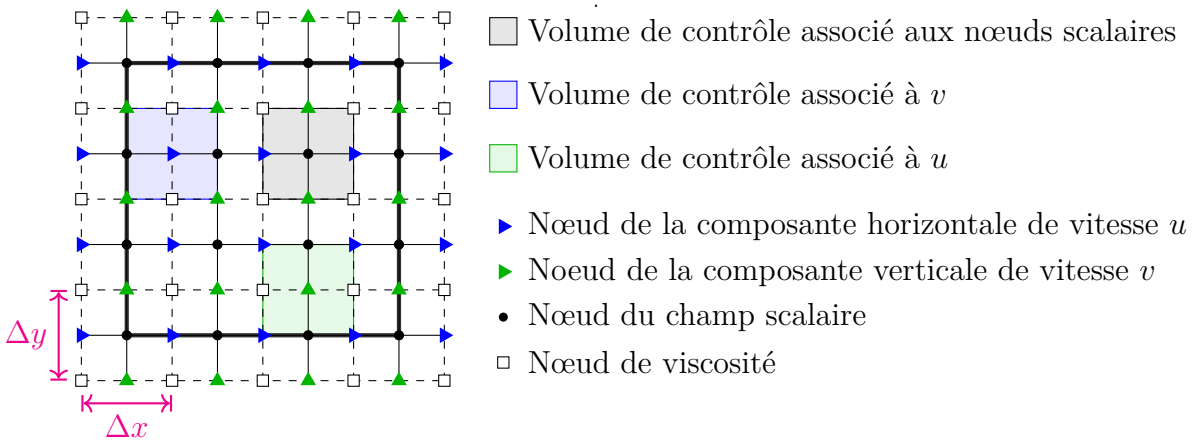



Figure 4.5 – Illustration 2D de la grille décalée

De par sa structure, le maillage décalé assure une robustesse pour une large variété de conditions aux limites et gère efficacement les opérateurs différentiels, ce qui permet de réduire les risques d'instabilités numériques, telles que les oscillations non-physiques.

#### 4.2.2.1 Discrétisation des équations de Navier-Stokes

La discrétisation de l'équation de conservation de la quantité de mouvement sur le volume de contrôle $\Omega_{i,j}$ s'écrit :

$$\int_{\Omega_{i,j}} \frac{\rho}{\Delta t}(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n)\mathrm{d}V + \int_{\Omega_{i,j}} \rho \nabla \cdot (\mathbf{u}^n \otimes \mathbf{u}^{n+1})\mathrm{d}V = -\int_{\Omega_{i,j}} \nabla p^{n+1}\ \mathrm{d}V + \int_{\Omega_{i,j}} \rho \mathbf{g}\ \mathrm{d}V + \int_{\Omega_{i,j}} \nabla \cdot \overline{\boldsymbol{\tau}}^{n+1}\ \mathrm{d}V + \int_{\Omega_{i,j}} \mathbf{f}_{CSF}\ \mathrm{d}V + \int_{\Omega_{i,j}} \overline{\mathbf{B}}(f(\mathbf{u}^{n+1}) - \mathbf{n}_\infty)\ \mathrm{d}V \tag{4.13}$$

où $\overline{\mathbf{B}}(f(\mathbf{u}^{n+1}) - \mathbf{u}_\infty)$ désigne le terme de pénalisation, introduit afin de traiter de manière spécifique les conditions aux limites, comme cela sera détaillé dans la section 4.2.3. Cette intégrale de volume est transformée en intégrale de surface sur le contour $\partial\Omega_{i,j}$ délimitant le volume $\Omega_{i,j}$, de normale sortante $\mathbf{n}$, en se basant sur le théorème de la divergence. Ainsi, on obtient :

$$\int_{\Omega_{i,j}} \frac{\rho}{\Delta t}(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n)\, \mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega_{i,j}} \rho \mathbf{u}^n \mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{n}\, \mathrm{d}S = -\int_{\Omega_{i,j}} \nabla p^{n+1}\, \mathrm{d}V + \int_{\Omega_{i,j}} \rho \mathbf{g}\, \mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega_{i,j}} \overline{\boldsymbol{\tau}}^{n+1} \mathbf{n}\, \mathrm{d}S + \int_{\Omega_{i,j}} \mathbf{f}_{CSF}\, \mathrm{d}V + \int_{\Omega_{i,j}} \overline{\mathbf{B}}(f(\mathbf{u}^{n+1}) - \mathbf{n}_\infty)\, \mathrm{d}V \tag{4.14}$$

**Traitement du terme convectif :** l'intégration spatiale semi-implicite du terme convectif sur le volume de contrôle $\Omega_{i,j}$ de la grille décalée 2D illustrée sur la figure 4.5, est effectuée à l'aide d'un schéma centré d'ordre 2. Le flux convectif associé à la composante horizontale de la vitesse $u$ est ainsi discrétisé sur les différentes faces du contour $\partial\Omega_{i,j}$, délimitant le volume de contrôle $\Omega_{i,j}$ illustré dans la figure 4.6 , comme suit :

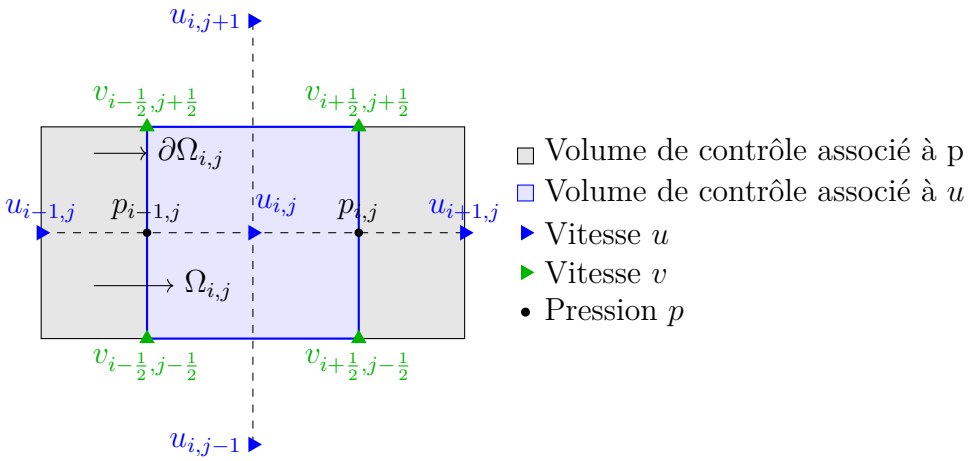



FIGURE 4.6 – Disposition des nœuds de vitesse sur une grille décalée vitesse-pression pour la composante u

$$\int_{\partial\Omega_{i,j}} \rho \mathbf{u}^n \mathbf{u}^{n+1}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}S = \rho_{i,j} \left( \frac{u^n_{i,j} + u^n_{i+1,j}}{2} \frac{u^{n+1}_{i,j} + u^{n+1}_{i+1,j}}{2} - \frac{u^n_{i-1,j} + u^n_{i,j}}{2} \frac{u^{n+1}_{i-1,j} + u^{n+1}_{i,j}}{2} \right) \Delta y + \rho_{i,j} \left( \frac{v^n_{i,j} + v^n_{i,j+1}}{2} \frac{u^{n+1}_{i,j} + u^{n+1}_{i,j+1}}{2} - \frac{v^n_{i,j-1} + v^n_{i,j}}{2} \frac{u^{n+1}_{i,j-1} + u^{n+1}_{i,j}}{2} \right) \Delta y \tag{4.15}$$

Un développement équivalent est effectué suivant les autres directions de l'espace y et z pour les écoulements 3D.

**Traitement du terme visqueux :** ici, on rappelle que le terme visqueux $\overline{\boldsymbol{\tau}}$ de l'équation de quantité de mouvement s'écrit comme suit :

$$\overline{\boldsymbol{\tau}} = \mu\Big[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^{\intercal}\Big] \tag{4.16}$$

La discrétisation implicite de ce terme dans le volume de contrôle $\Omega_{i,j}$, délimité par le contour $\partial\Omega_{i,j}$, suivant la composante horizontale de la vitesse $\mathbf{u}$, se fait avec un schéma centré :

$$\begin{aligned}\int_{\partial\Omega_{i,j}} \overline{\boldsymbol{\tau}}^{n+1}\mathbf{n}\,\mathrm{d}S = &\left(\mu_{i,j}\frac{u_{i,j}^{n+1}-u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} - \mu_{i,j}\frac{u_{i+1,j}^{n+1}-u_{i,j}^{n+1}}{\Delta x}\right)\Delta y \\ &+ \mu_{i,j}\left(\frac{u_{i,j}^{n+1}-u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j}^{n+1}-v_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{u_{i,j+1}^{n+1}-u_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1}^{n+1}-v_{i,j}^{n+1}}{\Delta y}\right)\Delta y\end{aligned} \tag{4.17}$$

**Traitement du terme de gradient de pression :** l'écriture discrète de la composante horizontale du gradient de pression de l'équation de quantité de mouvement, (4.14), s'exprime sur la face ouest du volume de contrôle associée à la pression $p$, illustrée en figure 4.7, via un schéma centré sur la grille décalée 2D, comme suit :

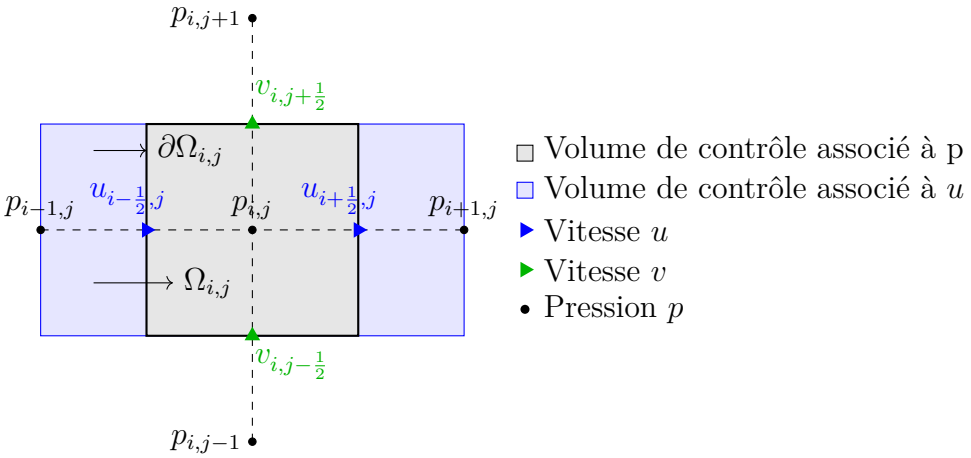



FIGURE 4.7 – Disposition des nœuds de pression sur une grille décalée vitesse-pression pour le champ de pression

$$\int_{\partial\Omega_{i,j}} p^{n+1}\mathbf{n}\,\mathrm{d}S = \left(p_{i,j}^{n+1} - p_{i-1,j}^{n+1}\right)\Delta y \tag{4.18}$$

**Traitement du terme capillaire $\mathbf{f}_{CSF}$ :** ce terme source, $\mathbf{f}_{CSF}$ traduisant les forces capillaires dans l'équation de quantité de mouvement (4.14), est modélisé dans ce travail à travers le modèle CSF (Continuum Surface Force) initialement introduit par BRACKBILL,

Kothe et Zemach [13] dans le cadre de la formulation à 1-fluide. Ce modèle consiste à traiter les forces de tension superficielles comme des forces volumiques continues dans le volume de contrôle contenant l'interface, plutôt que comme des forces surfaciques localisées. Cette régularisation rend cette approche compatible avec les méthodes eulériennes de capture d'interface (VOF, Level-set) qui offrent une représentation diffuse de celle-ci, permettant ainsi une intégration naturelle des forces capillaires sur la grille eulérienne fixe.
La force volumique $\mathbf{f}_{CSF}$ est exprimée en chaque nœud de la grille eulérienne en fonction des gradients locaux des variables qui la constituent.

$$\mathbf{f}_{CSF} = \sigma\kappa\mathbf{n}\delta_I \tag{4.19}$$

Pour la discrétisation de ce terme, nous rappelons les relations suivantes :

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} \quad ; \quad \mathbf{n} = \frac{\nabla\alpha}{||\nabla\alpha||} \quad ; \quad \mathbf{n}\delta_I = \nabla\alpha \tag{4.20}$$

Il vient donc :

$$\mathbf{f}_{CSF} = \int_{\Omega_{i,j}} \sigma\nabla.\mathbf{n}\nabla\alpha \, \mathrm{d}V \tag{4.21}$$

$\alpha$ étant la fraction volumique, dont la composante horizontale du gradient s'écrit :

$$\frac{\partial\alpha}{\partial x} = \frac{\alpha_{i,j} - \alpha_{i-1,j}}{\Delta x} \tag{4.22}$$

**Traitement du terme de la divergence de vitesse :** le terme de divergence de vitesse est évalué au centre des cellules tel que :

$$\int_{\Omega_{i,j}} \nabla.\mathbf{u}^{n+1} \, \mathrm{d}V = \left( \frac{u^{n+1}_{i+1,j} - u^{n+1}_{i,j}}{\Delta x} + \frac{v^{n+1}_{i,j+1} - v^{n+1}_{i,j}}{\Delta y} \right) \Delta x \Delta y \tag{4.23}$$

#### 4.2.2.2 Discrétisation de l'équation de concentration des espèces

De même que pour la quantité de mouvement, l'équation de conservation des espèces est discrétisée sur le volume de contrôle $\Omega_{i,j}$ comme suit :

$$\begin{aligned}\int_{\Omega_{i,j}} \frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} \, \mathrm{d}V + \int_{\Omega_{i,j}} \nabla \cdot \left(\mathbf{u}C^{n+1}\right) \, \mathrm{d}V = \int_{\Omega_{i,j}} \nabla \cdot \left(\langle D\rangle_h \nabla C^{n+1}\right) \, \mathrm{d}V \\ - \int_{\Omega_{i,j}} \nabla \cdot \left( \langle D\rangle_h \frac{C^{n+1}\left[1 - \mathrm{He}\right]}{\left(\alpha + \left[1-\alpha\right]\mathrm{He}\right)} \nabla\alpha \right) \, \mathrm{d}V\end{aligned} \tag{4.24}$$

En utilisant le théorème de la divergence, qui transforme les intégrales de volume en intégrales de surface, l'équation (4.24) devient :

$$\int_{\Omega_{i,j}} \frac{C^{n+1}-C^n}{\Delta t}\,\mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega_{i,j}} C^{n+1}\left(\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}\right)\mathrm{d}S = \int_{\partial\Omega_{i,j}} \langle D\rangle_h \left(\nabla C^{n+1}\cdot\mathbf{n}\right)\mathrm{d}S - \int_{\partial\Omega_{i,j}} \langle D\rangle_h \frac{C^{n+1}\Big[1-\mathrm{He}\Big]}{\alpha+\Big[1-\alpha\Big]\mathrm{He}}\left(\nabla\alpha\cdot\mathbf{n}\right)\mathrm{d}S \tag{4.25}$$

**Traitement du terme d'advection :** l'intégration spatiale implicite du terme d'advection sur le volume de contrôle $\Omega_{i,j}$ de la grille décalée 2D se fait au niveau des nœuds scalaires, de manière similaire à la discrétisation du champ de pression illustrée en figure 4.7, suivant un schéma centré comme suit :

$$\int_{\partial\Omega_{i,j}} C^{n+1}\left(\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}\right)\mathrm{d}S = u_{i+\frac{1}{2},j}\frac{C^{n+1}_{i+1,j}+C^{n+1}_{i,j}}{2} - u_{i-\frac{1}{2},j}\frac{C^{n+1}_{i,j}+C^{n+1}_{i-1,j}}{2} \tag{4.26}$$

Les vitesses étant naturellement portées sur les faces délimitant le volume de contrôle du champ scalaire, comme illustré sur la figure 4.7, l'expression (4.26) se réécrit :

$$\int_{\partial\Omega_{i,j}} C^{n+1}\left(\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}\right)\mathrm{d}S = u_{i+1,j}\frac{C^{n+1}_{i+1,j}+C^{n+1}_{i,j}}{2} - u_{i,j}\frac{C^{n+1}_{i,j}+C^{n+1}_{i-1,j}}{2} \tag{4.27}$$

**Traitement du terme de diffusion :** la discrétisation implicite du terme de diffusion dans le volume de contrôle $\Omega_{i,j}$ se fait suivant un schéma centré :

$$\int_{\partial\Omega_{i,j}} \langle D\rangle_h(\nabla C^{n+1})\cdot\mathbf{n}\,\mathrm{d}S = \left(\langle D_{i+1,j}\rangle_h\frac{C^{n+1}_{i+1,j}-C^{n+1}_{i,j}}{\Delta x} - \langle D_{i,j}\rangle_h\frac{C^{n+1}_{i,j}-C^{n+1}_{i-1,j}}{\Delta x}\right)\Delta y \tag{4.28}$$

**Traitement du terme source supplémentaire :** le terme supplémentaire, $\mathbf{\Psi} = \langle D\rangle_h\frac{C(1-\mathrm{He})}{(\alpha+[1-\alpha]\mathrm{He})}\nabla\alpha$ traduisant les transferts de masse au niveau de l'interface, est discrétisé de manière implicite sur le volume de contrôle illustré sur la figure 4.7 comme suit :

$$\int_{\partial\Omega_{i,j}} \langle D\rangle_h\frac{C^{n+1}[1-\mathrm{He}]}{\alpha+[1-\alpha]\mathrm{He}}\nabla\alpha\cdot\mathbf{n}\,\mathrm{d}S = \langle D_{i+1,j}\rangle_h\frac{1-\mathrm{He}}{(1-\alpha_{i+\frac{1}{2},j})\mathrm{He}+\alpha_{i+\frac{1}{2},j}}\frac{C^{n+1}_{i+1,j}+C^{n+1}_{i,j}}{2}\frac{\alpha_{i+1,j}-\alpha_{i,j}}{\Delta x}\Delta y - \langle D_{i,j}\rangle_h\frac{1-\mathrm{He}}{(1-\alpha_{i-\frac{1}{2},j})\mathrm{He}+\alpha_{i-\frac{1}{2},j}}\frac{C^{n+1}_{i,j}+C^{n+1}_{i-1,j}}{2}\frac{\alpha_{i,j}-\alpha_{i-1,j}}{\Delta x}\Delta y \tag{4.29}$$

Où la variable discrète de la fraction volumique est exprimée sur les nœuds de vitesse par

des demi-sommes :

$$\alpha_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\alpha_{i+1,j} + \alpha_{i,j}}{2} \quad ; \quad \alpha_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{\alpha_{i,j} + \alpha_{i-1,j}}{2}. \tag{4.30}$$

### 4.2.3 Traitement des conditions aux limites

La résolution couplée des champs de vitesse et de pression selon la méthode "tout couplé" est associée à un traitement spécifique des conditions aux limites, qu'elles soient de type Dirichlet ou Neumann, via la méthode de pénalisation. Implémentée dans le code FUGU pour gérer les obstacles solides, cette approche a été conservée pour le traitement des frontières. Elle implique l'ajout d'un terme supplémentaire, dit terme de pénalisation, $\overline{\mathbf{B}}(f(\mathbf{u}^{n+1}) - \mathbf{u}_\infty)$ à l'équation de la quantité de mouvement [2] :

$$\begin{aligned}\frac{\rho}{\Delta t}(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) + \rho\nabla\cdot\left(\mathbf{u}^n \otimes \mathbf{u}^{n+1}\right) = \rho\mathbf{g} - \nabla p^{n+1} + \nabla\cdot\overline{\boldsymbol{\tau}}^{n+1} + \mathbf{f}_{CSF} \\ + \overline{\mathbf{B}}(f(\mathbf{u}^{n+1}) - \mathbf{u}_\infty)\end{aligned} \tag{4.31}$$

où $\overline{\mathbf{B}}$ est le tenseur de pénalisation, dont les coefficients sont nuls à l'intérieur du domaine de calcul et tendent vers l'infini sur les mailles de bords pénalisées. $\mathbf{u}_\infty$ représente la condition de vitesse imposée sur les frontières du domaine de calcul. La fonction $f(\mathbf{u}^{n+1})$ est une combinaison linéaire des valeurs discrètes de vitesses qui s'écrit pour un problème 2D sous la forme :

$$f(u^{n+1}) = a_0 u_{i,j}^{n+1} + a_1 u_{i+1,j}^{n+1} + a_2 u_{i-1,j}^{n+1} + a_3 u_{i,j+1}^{n+1} + a_4 u_{i,j-1}^{n+1} \tag{4.32}$$

$$f(v^{n+1}) = a'_0 v_{i,j}^{n+1} + a'_1 v_{i+1,j}^{n+1} + a'_2 v_{i-1,j}^{n+1} + a'_3 v_{i,j+1}^{n+1} + a'_4 v_{i,j-1}^{n+1} \tag{4.33}$$

Les valeurs des coefficients $a_k$ et $a'_k$ $(k = 0, \ldots, 4)$, qui pondèrent les combinaisons des composantes normale et tangentielle des vitesses, dépendent du type de conditions aux limites et des frontières sur lesquelles elles sont imposées.

— Pour des conditions de type Dirichlet, la combinaison des composantes normale et tangentielle à la frontière gauche, illustrée sur la figure 4.8, s'écrit :

$$f(u^{n+1}) - u_\infty = \frac{1}{2}u_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{2}u_{i+1,j}^{n+1} - u_\infty \tag{4.34}$$

$$f(v^{n+1}) - v_\infty = v_{i,j}^{n+1} - v_\infty \tag{4.35}$$

— Pour des conditions de type Neumann, la combinaison de la composante normale à la frontière gauche, illustrée sur la figure 4.8, s'écrit :

$$f(u^{n+1}) - u_\infty = -u_{i,j}^{n+1} + u_{i+1,j}^{n+1} - u_\infty \tag{4.36}$$

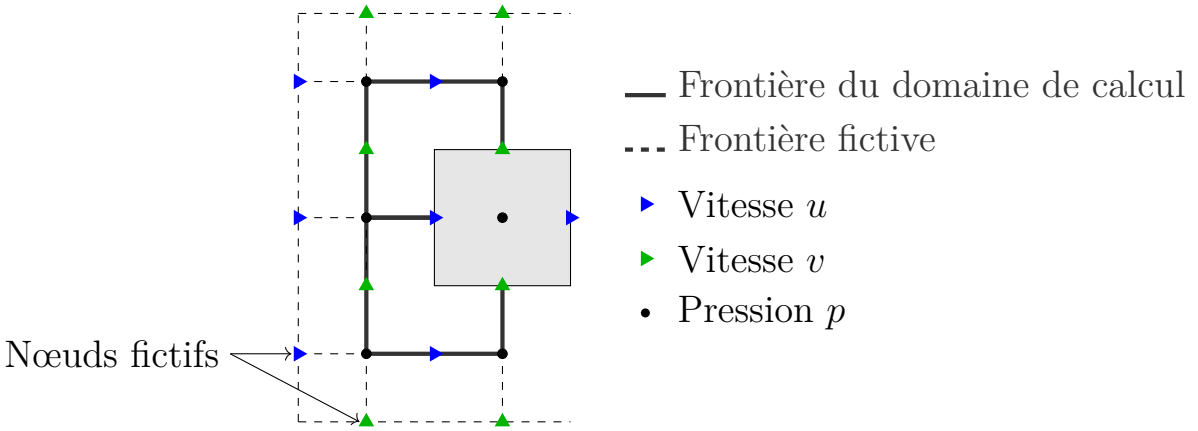



FIGURE 4.8 – Illustration des nœuds fictifs de vitesse sur une grille décalée vitesse-pression

### 4.2.4 Solveur de résolution des équations de conservation

La résolution du système linéaire issu de la discrétisation des équations de Navier–Stokes selon une approche en volumes finis, telle que présentée dans la section précédente, peut être abordée suivant deux grandes catégories de solveurs : les *méthodes découplées* et *les méthodes couplées*. La première, dite *approche découplée*, consiste à résoudre séparément, de manière séquentielle, les champs de vitesse et de pression. C'est notamment le cas de la méthode de projection [28, 156]. Bien que largement utilisée, cette approche présente plusieurs limitations : elle impose l'utilisation de pas de temps très réduits pour assurer la stabilité, et elle se montre peu adaptée aux écoulements mettant en jeu des fluides aux rapports de propriétés physiques fortement contrastés. La seconde, *approche couplée* consiste à résoudre simultanément les champs de vitesse et de pression, en les considérant comme une variable unique dans un schéma de couplage. L'un des principaux défis de cette méthode réside dans la satisfaction simultanée de la contrainte d'incompressibilité et de la conservation de la quantité de mouvement. Toutefois, cette approche offre une meilleure robustesse numérique et une efficacité accrue dans des contextes où les méthodes découplées atteignent leurs limites.

Dans le cadre du présent travail, une stratégie de résolution couplée du système matriciel générique a été retenue. Le solveur couplé mis en œuvre a été développé au sein du code de calcul du laboratoire Fugu par Elouafa, dans le cadre de sa thèse [140, 43, 44, 45]. Ce solveur permet la résolution simultanée de l'équation de conservation de la quantité de mouvement et de la contrainte d'incompressibilité, en les intégrant dans un système unique qui assemble l'ensemble des composantes de vitesse et de pression au sein d'une matrice globale. Il en résulte ainsi un système linéaire non symétrique de type point-selle sous la forme $A\bar{x} = \bar{b}$, dont la structure est présentée ci-après :

$$\begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{n^{n+1}} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{4.37}$$

Où, après une discrétisation en volumes finis, on a :

- $A$ est une matrice de blocs correspondant aux différentes composantes du champ de vitesse associée aux termes diffusif et convectif : $A\mathbf{u}^{n+1} = \int_{\Omega_{i,j}} \frac{\rho}{\Delta t}\mathbf{u}^{n+1}\ \mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega_{i,j}} \rho\mathbf{u}^n\mathbf{u}^{n+1}\mathbf{n}\ \mathrm{d}S - \int_{\partial\Omega_{i,j}} \overline{S}^{n+1}\mathbf{n}\ \mathrm{d}S$
- $B$ est une matrice de blocs associée à la contrainte d'incompressibilité : $B\mathbf{u}^{n+1} = \int_{\Omega_{i,j}} \nabla.\mathbf{u}^{n+1}\ \mathrm{d}V$
- $B^T$ est une matrice de blocs associée au gradient de pression : $B^T p^{n+1} = -\int_{\Omega_{i,j}} \nabla p^{n+1}\ \mathrm{d}V$
- $f$ est le second membre associé à la vitesse : $f = \int_{\Omega_{i,j}} \mathbf{f}_{CSF}\ \mathrm{d}V + \int_{\Omega_{i,j}} \frac{\rho^n}{\Delta t}\mathbf{u}^n\ \mathrm{d}V$

où $\partial\Omega_{i,j}$ est le contour du volume de contrôle $\Omega_{i,j}$, et $\mathbf{n}$ sa normale sortante.

Compte tenu des propriétés du système linéaire $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ à résoudre, issu de la discrétisation des équations de Navier–Stokes, la matrice $A$ présente une structure particulièrement creuse, ne comportant que 11 diagonales non nulles, comme illustré à la figure 4.9. Plus généralement, en adoptant un schéma centré et en considérant un domaine bidimensionnel discrétisé selon un maillage de taille $N_x \times N_y$, le vecteur solution comporte $(N_x + 1) \times N_y$ composantes pour la vitesse $u$, $N_x \times (N_y + 1)$ composantes pour la vitesse $v$, et $N_x \times N_y$ composantes pour la pression $p$. Le nombre total de composantes est donc donné par :

$$N = 3N_xN_y + N_x + N_y,$$

et la matrice $A$ est une matrice carrée de dimension $N \times N$. En raison de cette structure très creuse, un solveur itératif de type BiCGStab(2) [42] a été retenu, car celui-ci s'avère particulièrement bien adapté à la résolution de ce type de systèmes [140].

Afin d'optimiser les performances du solveur itératif BiCGStab(2), un préconditionnement de la matrice $A$ est appliqué dans le but d'accélérer la convergence du solveur. Cette technique consiste à transformer le système linéaire initial en un système équivalent de la forme :

$$\mathcal{P}^{-1}A\mathbf{x} = \mathcal{P}^{-1}\mathbf{b}, \tag{4.38}$$

où $\mathcal{P}$ désigne la matrice de préconditionnement. Celle-ci constitue une approximation de $A$, choisie de manière à améliorer le conditionnement du système matriciel et, par conséquent, optimiser la résolution du solveur en réduisant le nombre d'itérations nécessaires à la convergence.

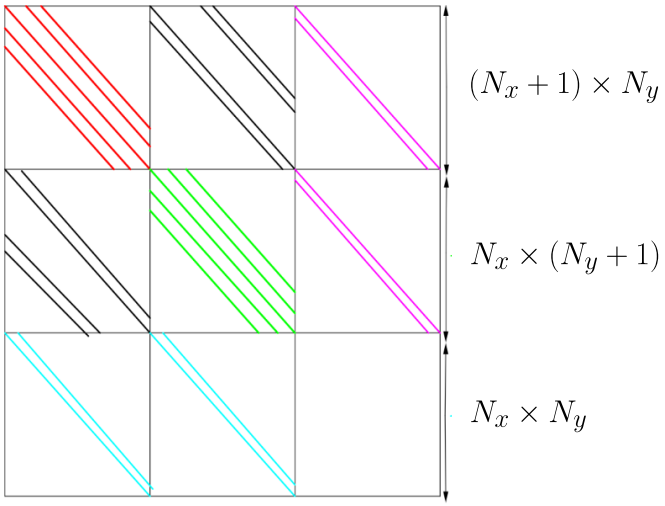



FIGURE 4.9 – Illustration de la structure de la matrice creuse à résoudre. 5 diagonales non nulles en rouge et en vert pour les composantes de vitesse $u$ et $v$. Les diagonales en noir représentent le couplage entre les composantes de vitesses $u$ et $v$. Les diagonales en magenta pour le gradient de pression et en cyan pour la divergence du champ de vitesse [140].

### 4.2.5 Test de validation de l'équation de diffusion stationnaire 1D dans une formulation à 1-fluide

#### Cas de diffusion stationnaire uni-dimensionnel (1D)

Le premier cas test élémentaire de validation du modèle à 1-fluide consiste en la diffusion 1D stationnaire à travers une interface statique séparant deux fluides immiscibles. À partir de l'équation 3.73, la formulation mathématique du problème étudié est la suivante :

$$\nabla \cdot \left( \langle D \rangle_h \nabla C - \langle D \rangle_h \frac{C\,[1 - \mathrm{He}]}{(\alpha + [1 - \alpha]\,\mathrm{He})} \nabla \alpha \right) = 0 \tag{4.39}$$

Avec des conditions aux limites de type Dirichlet appliquées aux bords du domaine :

$$\begin{aligned} \lim_{x \to -\infty} C &= C_l = 0, \\ \lim_{x \to +\infty} C &= C_g = 1. \end{aligned} \tag{4.40}$$

Le domaine de calcul étant rectangulaire de longueur caractéristique $L = 1$ m, dans lequel l'interface séparant les deux fluides est positionnée en $x_\Gamma = L/\pi$.
Au niveau de l'interface, une continuité du flux de diffusion, ainsi qu'un saut de concentration, sont considérés :

$$\begin{aligned} D_\ell \frac{\partial C_l}{\partial x}\bigg|_{\ell,\Gamma} &= D_g \frac{\partial C_g}{\partial x}\bigg|_{g,\Gamma}, \\ \mathrm{He}\, C_{\ell,\Gamma} &= C_{g,\Gamma}. \end{aligned} \tag{4.41}$$

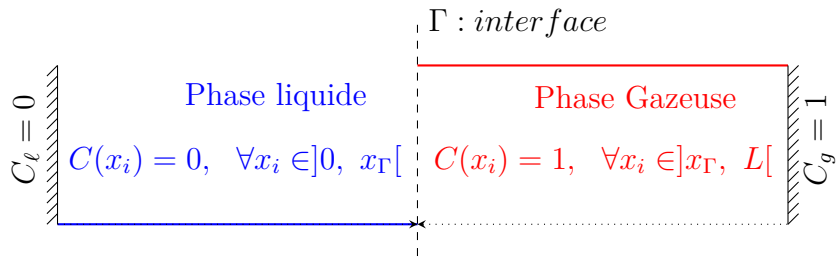



FIGURE 4.10 – Représentation du domaine d'étude d'un processus de diffusion unidimensionnel et instationnaire.

Dans le but d'évaluer la performance du modèle homogène à 1-fluide pour gérer les discontinuités aux interfaces, la constante de solubilité de Henry He sera modifiée de manière à activer (He $\neq 1$) et désactiver (He $= 1$) le saut de variable à travers l'interface en $x_\Gamma$. Une étude de convergence pour chacune de ces situations est effectuée par rapport à la solution analytique du problème, donnée par :

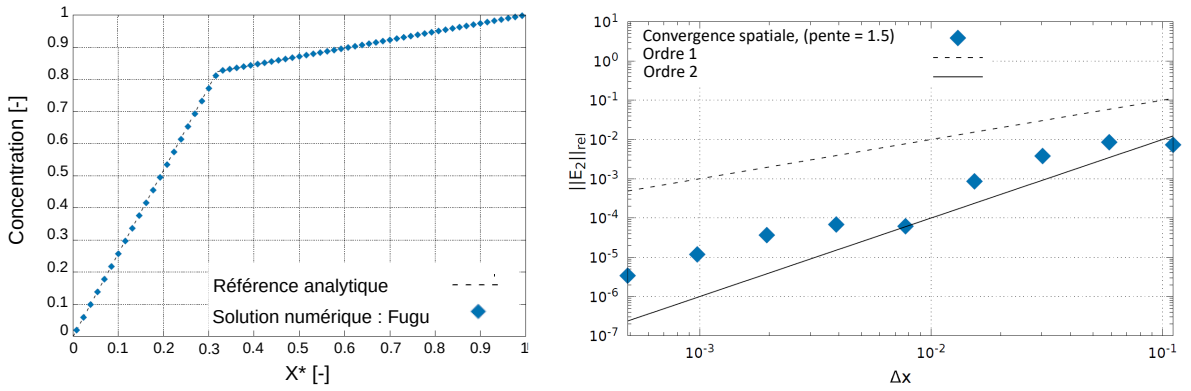
$$C(x) = \frac{C_g^0 - \mathrm{He} C_\ell^0}{\mathrm{He} + \frac{D_\ell}{D_g}} \frac{x}{x_\Gamma} + C_\ell^0 \qquad \forall x_i \in ]0,\ x_\Gamma[, \tag{4.42}$$

$$C(x) = \frac{C_g^0 - \mathrm{He} C_\ell^0}{\mathrm{He}\frac{D_g}{D_\ell} + 1} \frac{x - 2x_\Gamma}{x_\Gamma} + C_g^0 \qquad \forall x_i \in ]x_\Gamma,\ L[, \tag{4.43}$$

**Cas 1 : situation continue (He $= 1$) :** ce cas de validation se caractérise par un rapport de diffusivité $D_g/D_\ell = 10$ et par une continuité du champ de concentration à travers l'interface, imposée par He $= 1$. Cette configuration entraîne l'annulation du terme supplémentaire $\Psi = \langle D \rangle_h \frac{C[1-\mathrm{He}]}{\alpha + [1-\alpha]\mathrm{He}} \nabla \alpha$ dans l'équation 4.40, qui traduit la physique discontinue et régit le saut de variable à l'interface.

La figure 4.11a illustre l'évolution du profil de concentration le long de la direction $\mathbf{e}_x$. La solution numérique y apparaît en parfait accord avec la solution analytique de référence donnée par les équations (4.42) et (4.43), ce qui confirme la validité de la formulation à 1-fluide du problème étudié. Une étude de convergence est menée afin d'évaluer la qualité de la solution obtenue par cette approche, en estimant son niveau de précision ainsi que son ordre de convergence. L'évolution de l'erreur relative en norme $\|E_2\|_{\mathrm{rel}}$, calculée par rapport à la solution analytique, est représentée sur la figure 4.11b en fonction de différentes résolutions spatiales. Les résultats montrent que le modèle à 1-fluide converge à l'ordre 1,5, avec des erreurs particulièrement faibles atteignant $\|E_2\|_{\mathrm{rel}} = 2 \times 10^{-6}$ pour la résolution la plus fine ($N_x = 2048$).

**Cas 2 : situation discontinue (He $\neq 1$) :** à la différence du cas test précédent, le présent cas tient compte du terme additionnel à l'interface en imposant He $= 0.5$, tout

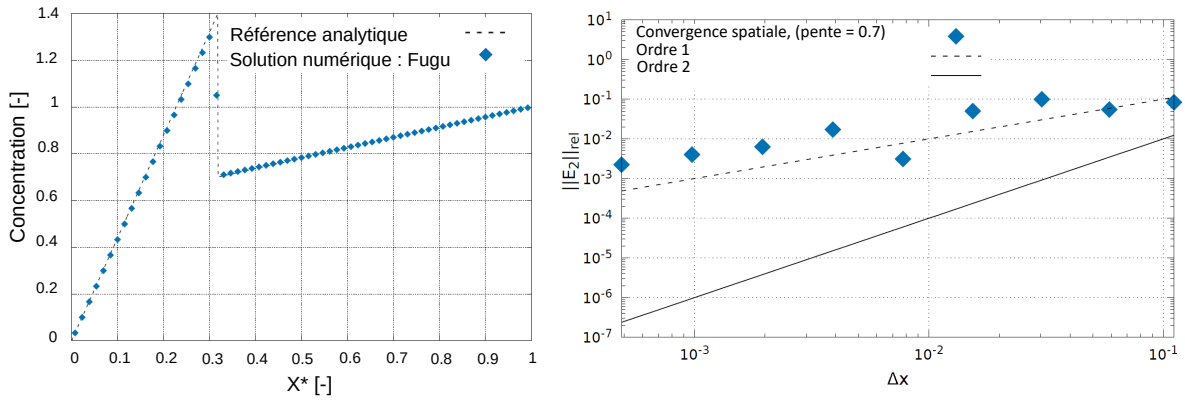



(a) (b)

FIGURE 4.11 – Validation du modèle à 1-fluide : (a) Profil de concentration dans la direction $\mathbf{e}_x$, (b) Évolution de l'erreur relative $\|E_2\|_{\text{rel}}$ pour différents maillages.

en conservant un rapport de diffusivité $D_g/D_\ell = 10$. L'objectif est d'évaluer la capacité du modèle à 1-fluide à représenter la discontinuité interfaciale induite par le terme $\Psi = \langle D \rangle_h \frac{C[1-\text{He}]}{\alpha+[1-\alpha]\text{He}} \nabla\alpha$ dans l'équation 4.40.

De façon analogue au cas précédent, la solution produite par le modèle est validée en comparant le profil numérique de concentration aux solutions analytiques (4.42) et (4.43). La figure 4.12a montre que la solution numérique se superpose à la référence dans les mailles monophasiques, à gauche et à droite de l'interface. En revanche, au niveau de l'interface, elle présente une solution homogénéisée qui s'écarte du comportement physique attendu, comme l'illustre le point situé sur l'interface dans la figure 4.12a. Ce résultat s'explique par le rôle du terme $\Psi$, qui s'active à l'interface $\nabla\alpha \neq 0$ et qui dépend principalement de l'estimation de la fraction volumique $\alpha$. En effet, le modèle à 1-fluide, étant une approche de mélange, diffuse naturellement l'information dans les mailles mixtes : la transition de $\alpha$ y est lissée et étalée sur plusieurs mailles autour de l'interface. Il en résulte une solution numérique localement homogénéisée, atténuant la discontinuité réelle au niveau interfacial. La figure 4.12b présente les résultats de convergence du champ de concentration. On constate que la prise en compte de la discontinuité, par l'activation du terme $\Psi$ ($\text{He} \neq 1$), entraîne une diminution de l'ordre de convergence par rapport au cas continu précédent ($\text{He} = 1$). Cette discontinuité réduit également la précision de la méthode : pour une même résolution spatiale ($N_x = 2048$), l'erreur relative $\|E_2\|_{\text{rel}}$ passe d'environ $2 \times 10^{-6}$ à $10^{-3}$.




(a) (b)

FIGURE 4.12 – Validation du modèle à un fluide : (a) Profil de concentration dans la direction $\mathbf{e}_x$ ; (b) Évolution de l'erreur relative $\|E_2\|_{\text{rel}}$ pour différents maillages.

**Remarque.** Des cas de validation supplémentaires, attestant de la validité du modèle à 1-fluide pour le champ de concentration, sont présentés dans l'article [41] issu de ces travaux de thèse.

## Conclusion partielle

Nous avons établi dans cette partie du chapitre le modèle à 1-fluide pour les équations de Navier–Stokes, ainsi que pour l'équation d'advection-diffusion de concentration des espèces. La physique de transfert de masse à l'interface caractérisée par les relations de saut donnés par (3.25) est prise en compte à travers l'ajout d'un terme source $\Psi$ dans l'équation d'advection–diffusion des espèces.

Nous avons dans un second temps présenté l'écriture discrète des équations de conservation du modèle à 1-fluide avec la méthode des volumes finis, sur une grille décalée. L'intégration temporelle de ces équations ainsi que le solveur de résolution de Navier-Stokes et le traitement des conditions aux limites ont aussi été abordés.

Pour finir cette partie, nous avons procédé à la validation du modèle à 1-fluide établi pour l'équation de concentration des espèces qui a été implémenté sur le code de recherche FUGU dans le cadre de ce travail.

CHAPITRE 5

# Modèle à 2-champs pour le problème d'advection diffusion : résultats et validation

## Structure du chapitre


5.1 Méthode Ghost-Fluid pour le transfert de masse . . . 108
5.2 Mise en place du modèle à deux champs . . . 111
5.2.1 Traitement du problème de pure diffusion . . . 112
5.2.1.1 Formalisme général pour le terme de diffusion : . . . 113
5.2.1.2 Application du formalisme général au cas particulier . . . 117
5.2.2 Résultats de validation du modèle de diffusion pure . . . 120
5.2.2.1 Étude de convergence sur le champ de concentration . . . 123
5.2.2.2 Étude de convergence sur le nombre de Sherwood . . . 123
5.2.3 Traitement du terme d'advection . . . 126
5.2.4 Validation de la modélisation du problème d'advection-diffusion . . . 130
5.3 Splitting de l'équation de transfert de masse . . . 133
5.3.1 Schéma discret à deux champs . . . 134
5.3.1.1 Approximation par la condition de saut . . . 136
5.3.1.2 Approximation par une combinaison des cellules voisines $C_J$ 137
5.3.1.3 Approximation par une concentration interfaciale $C_{p_J^M,\Gamma_{IJ}}$ . 137
5.3.2 Schéma discret à deux champs pour l'équation de diffusion de masse 140
5.3.3 Résultats des différents schémas temporels pour la diffusion instationnaire . . . 144
5.3.3.1 Transfert extérieur $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$ . . . 145
5.3.3.2 Transfert intérieur $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \ll 1$ . . . 150
5.3.3.3 Transfert conjugué $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \simeq 1$ . . . 155
5.3.4 Résultats de validation des schémas de transport . . . 160
5.3.4.1 Rotation en bloc d'un disque 2D . . . 160
5.3.4.2 Translation de bulle 3D . . . 170
5.4 Simulations 3D du transfert de masse à travers une bulle en ascension . . . 176

Le modèle continu de l'équation de concentration des espèces, introduit précédemment, s'est montré robuste et convergent. Toutefois, étant caractérisé par des interfaces lissées et étalées sur plusieurs mailles, il implique la perte du caractère localement discontinu des variables à travers l'interface et rend diffuse la position du front. Cette approche garantit la continuité et la différentiabilité des variables discontinues, mais conduit, en contrepartie, à une solution numérique qui s'écarte du comportement physique réel au niveau de l'interface. De ce fait, nous proposons dans cette partie une autre catégorie de méthodes plus adaptée à la modélisation des transferts de masse. Elle consiste à traiter rigoureusement la physique discontinue à travers l'interface, en y appliquant explicitement les relations de saut, qui sont par conséquent directement incorporées dans la formulation numérique. Cette approche numérique s'appuie sur un couplage entre une résolution phasique "à deux champs" et la méthode Ghost-Fluid (GFM), introduite par Fedkiw, Aslam et Xu [49], pour les équations d'Euler soumises à des conditions de saut de type "Rankine-Hugoniot". L'objectif principal est de fournir un traitement numérique adéquat pour les interfaces raides, sans recourir à une épaisseur de transition artificielle, tout en préservant la différentiabilité locale des champs résolus. Cette méthode présente plusieurs avantages :

— elle permet de restituer des solutions discontinues précises, en accord avec le comportement physique attendu au voisinage des interfaces,
— elle garantit l'applicabilité et la convergence des schémas numériques en palliatif aux difficultés liées à la non-différentiabilité des fonctions discontinues,
— enfin, elle évite l'apparition d'oscillations numériques non physiques ainsi que la diffusion artificielle indésirable résultant d'un traitement inadéquat des discontinuités.

Pour cela, la GFM constitue une alternative pertinente au modèle à un fluide de Haroun, Raynal et Legendre [71], en préservant le caractère discontinu de la physique du transfert de masse interfacial, gouverné par le saut homotétique des variables. Dans cette optique, la méthode Ghost-Fluid est utilisée pour traiter l'équation d'advection-diffusion des espèces dans le cadre d'une modélisation à deux-champs.

## 5.1 Méthode Ghost-Fluid pour le transfert de masse

La GFM combine la simplicité des schémas Eulériens avec l'avantage des méthodes lagrangiennes capables de maintenir des interfaces nettes. Ainsi, elle surmonte les limites typiques de ces deux approches classiques : d'un côté, les méthodes eulériennes standard ont tendance à lisser les discontinuités interfaciales, tandis que les méthodes lagrangiennes, bien qu'efficaces pour suivre les interfaces raides, rencontrent des difficultés en présence de fortes déformations topologiques. Grâce à sa précision dans le traitement des sauts, et sa

relative simplicité d'implémentation, la GFM demeure aujourd'hui une approche particulièrement attrayante pour la modélisation des phénomènes présentant des discontinuités aux interfaces. Elle se prête en outre naturellement à des géométries multidimensionnelles, notamment grâce à un traitement directionnel, ce qui facilite son application à une grande variété de configurations physiques.

Depuis sa conception, la méthode a été utilisée avec succès dans un large éventail de cas tests en écoulements multicomposants, démontrant sa robustesse dans la gestion des discontinuités de propriétés aux interfaces. Elle a été adoptée pour résoudre des équations de Poisson à coefficients discontinus en plusieurs dimensions [102], et étendue aux écoulements multiphasiques incompressibles avec prise en compte de la viscosité et de la tension de surface [85]. Très rapidement, la méthode Ghost–Fluid s'est imposée comme une approche de pointe pour la simulation de phénomènes complexes caractérisés par des discontinuités de propriétés physiques aux interfaces. Elle a été utilisée avec succès pour modéliser les sauts de pression induits par la tension superficielle et les contraintes visqueuses dans les écoulements gaz-liquide [139, 27, 31]. Dans ce cadre, le travail de Chirammel, Sharma et Murallidharan [27] s'appuie sur le principe des nœuds fantômes de la GFM pour introduire une méthode Level–Set à interface nette (Sharp Interface Level-Set Method, SI-LSM) mise en œuvre sur une grille co-localisée. De son côté, Couderc [31] a appliqué la GFM pour étudier l'atomisation des jets liquides. Par ailleurs, la méthode a été étendue à la résolution de l'équation de la chaleur avec conditions de saut sur la température dans des situations de changement de phase [96], ainsi qu'à la simulation de l'évaporation de gouttelettes, de l'ébullition tridimensionnelle et de la formation et de la condensation de bulles [138, 113, 155]. Elle a également été utilisée pour étudier les collisions de gouttelettes dans des dispositifs microfluidiques [59, 139]. Plus récemment, Ianniello [77, 78, 76] et ses collaborateurs ont proposé une version améliorée. Leur approche consiste à éviter l'utilisation des coefficients effectifs dans l'évaluation des dérivées en introduisant un terme source explicite dans l'équation de Poisson. Les auteurs montrent que cette idée améliore significativement la précision des résultats ainsi que l'ordre global de convergence de la méthode.

Notre contribution ici consiste à étendre ce formalisme GFM à la problématique d'advection diffusion des espèces, qui est caractérisée par une physique discontinue à l'interface. Contrairement au modèle de mélange à 1-fluide décrit dans le chapitre précédent 3.2.4, page 79, nous résolvons deux problèmes mono-fluides, c'est-à-dire que l'équation des espèces est résolue dans chaque domaine fluide et couplée explicitement par les relations de saut données par (3.25), sans qu'aucune régularisation des discontinuités ne soit nécessaire, comme décrit dans la section suivante 5.2.

## Principe de la méthode

L'idée de base repose sur l'introduction de cellules fantômes ou nœuds fantômes, au sein desquels un fluide artificiel est défini par une extension continue du fluide réel à travers l'interface, afin de définir chaque fluide dans l'intégralité du domaine (voir Fig 5.1). Ainsi, les champs physiques, bien que discontinus en réalité, sont rendus continus dans la formulation numérique, ce qui facilite l'approximation robuste des dérivées au voisinage de l'interface.

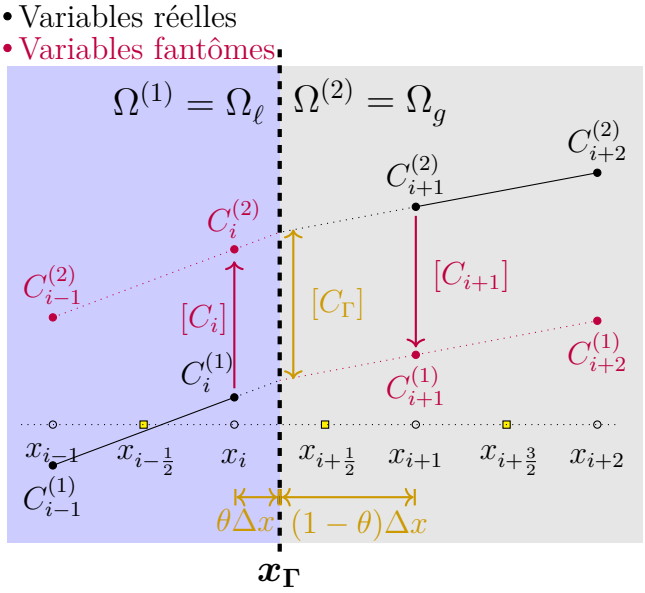



FIGURE 5.1 – Schéma de la méthode Ghost Fluid avec une interface située en $x_I$, séparant le domaine $\Omega^{(1)} = \Omega_\ell$ (phase liquide) du domaine $\Omega^{(2)} = \Omega_g$ (phase gazeuse)

Le schéma en figure 5.1 permet d'expliquer plus en détail le principe de la méthode. On y représente un domaine $\Omega$ divisé en deux sous-domaines $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$, séparés par une interface $\Gamma$ à travers laquelle les relations de saut sont appliquées et étendues au voisinage. Les champs physiques réels sont représentés en couleur noire, tandis que les variables fantômes, correspondant aux extensions des champs réels à travers l'interface conformément aux relations de saut, sont représentées par des points rouges. Ainsi, des fluides fictifs sont définis de part et d'autre de l'interface par prolongement "artificiel" continu de chacun des sous-domaines $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$, lesquels coexistent désormais sur l'ensemble du domaine.
Comme mentionné précédemment, la GFM s'inscrit dans un cadre purement eulérien et s'appuie sur une fonction distance $\theta$, souvent issue de la méthode Level-Set. Celle-ci est introduite pour localiser précisément la position sous-maille de l'interface, qui permet d'évaluer les distances séparant l'interface des nœuds adjacents $i$ et $i+1$. Dans le présent travail, qui s'appuie sur une approche VOF géométrique, la position de l'interface au sein de chaque maille est déterminée à partir de la fraction volumique $\alpha$, comme décrit plus loin à la page 115, selon la relation (5.9).

## 5.2 Mise en place du modèle à deux champs

Le modèle proposé dans ce travail repose sur la résolution des équations de concentration spécifiques à chaque phase, définies respectivement dans les sous-domaines $\Omega^{(1)} = \Omega_\ell$ et $\Omega^{(2)} = \Omega_g$, illustrés sur la figure 5.1. Dans les cellules diphasiques, où les deux phases (liquide/gaz) coexistent, une seule variable est résolue par maille. Celle-ci correspond à la concentration associée à la phase majoritaire. Cette approche conduit à la formulation suivante :

$$\frac{\partial C_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\, C_p) = \nabla \cdot (D_p \nabla C_p) \tag{5.1}$$

où les champs de concentration monophasiques $C_p$, pour $p \in \{\ell, g\}$, sont définis comme suit :

$$C_p = \begin{cases} C_\ell & \text{si } \alpha \geq 0,5 \\ C_g & \text{sinon} \end{cases} \tag{5.2}$$

avec $D_\ell$ et $D_g$ les coefficients de diffusion dans les phases liquide et gazeuse, respectivement. $\alpha$ désigne la fraction volumique dans le domaine, évaluée préalablement à l'instant courant $n+1$.

La résolution de l'équation d'advection-diffusion des espèces (5.1) est effectuée de manière implicite. Avant la discrétisation spatiale, une intégration temporelle est réalisée à l'aide d'un schéma d'Euler d'ordre 1. L'intégration au sens des volumes finis sur le volume de contrôle $\Omega_I$, associé à la maille centrée en $I = (x_i, y_j, z_k)$, s'écrit comme suit :

$$\int_{\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p} \left(\frac{\partial C_p}{\partial t}\right)^{n+1} \mathrm{d}V + \int_{\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p} \nabla \cdot \left(\mathbf{u}\, C_p^{n+1}\right)\, \mathrm{d}V = \int_{\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p} \nabla \cdot \left(D_p \nabla C_p^{n+1}\right) \mathrm{d}V \tag{5.3}$$

En utilisant le théorème de la divergence, on transforme les intégrales de volume en intégrales surfaciques :

$$\int_{\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p} \left(\frac{\partial C_p}{\partial t}\right)^{n+1} \mathrm{d}V + \int_{\partial(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p)} C_p^{n+1} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}\, \mathrm{d}S = \int_{\partial(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p)} D_p \left(\nabla C_p^{n+1} \cdot \mathbf{n}\right) \mathrm{d}S \tag{5.4}$$

Afin d'alléger les expressions dans les développements qui suivent, les variables de concentration à l'instant $(n+1)$ de la phase $p \in \{\ell, g\}$ sont remplacées par $C_p$.

Le problème étant formulé, la partie suivante décrit la stratégie selon laquelle la méthode Ghost-Fluid est mise en œuvre pour le traitement du terme diffusif.

### 5.2.1 Traitement du problème de pure diffusion

Avant de procéder à la discrétisation de la composante diffusive du problème étudié, il convient d'introduire les notions fondamentales nécessaires à la construction du modèle GFM. L'attention se porte principalement sur la physique discontinue, caractérisée par des sauts homothétiques à travers l'interface, qui constituent l'un des éléments clés de cette approche. Pour cela, on s'appuie sur le schéma explicatif présenté à la figure 5.1 : les variables réelles, représentées en noir, y sont prolongées à travers l'interface afin de définir des variables dites fantômes, situées dans un domaine fictif, représentées en rouge. Ces variables sont construites de manière à satisfaire les conditions de saut propres au problème de diffusion des espèces, rappelées ci-dessous :

— Le ratio de concentration, imposant un saut homothétique de variables,

$$He \cdot C_{\ell,\Gamma} = C_{g,\Gamma} \tag{5.5}$$

— Une continuité des flux de diffusion

$$D_\ell \left(\nabla C_{\ell,\Gamma} \cdot \mathbf{n}_\ell\right) = - D_g \left(\nabla C_{g,\Gamma} \cdot \mathbf{n}_g\right) \tag{5.6}$$

La subtilité de l'approche proposée dans ce travail réside dans la manière dont le saut homothétique est réinterprété et adapté à la situation particulière du saut constant, largement traité dans la littérature. Afin d'adopter la même méthodologie que celle proposée par Fedkiw et al. [50], où un saut constant est considéré à l'interface, le saut homothétique décrit par la relation (5.5) est reformulé :

$$\begin{aligned} a &\equiv C_{g,\Gamma} - C_{\ell,\Gamma} \\ &= C_{\ell,\Gamma} \left(\mathrm{He} - 1\right) \end{aligned} \tag{5.7}$$

De manière générale, les variables fantômes définies dans les sous-domaines $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$ sont construites de manière à satisfaire les relations suivantes :

$$C_g^{(1)} = C_g^{(2)} - a \quad \text{et} \quad C_\ell^{(2)} = C_\ell^{(1)} + a \tag{5.8}$$

Les variables $C_\ell^{(2)}$ et $C_g^{(1)}$ font référence aux variables fantômes associées aux variables nodales résolues, respectivement $C_\ell^{(1)}$ et $C_g^{(2)}$, comme illustré sur la figure 5.1. Cette formulation permet de prolonger les champs de concentration au-delà de l'interface, sur des nœuds fantômes. Cela permet d'assurer la continuité et la dérivabilité des champs discrets à travers l'interface.

#### 5.2.1.1 Formalisme général pour le terme de diffusion :

Le formalisme généralisé du principe de la méthode Ghost-Fluid, appliqué au problème de transfert de masse, est présenté dans cette section. Dans ce qui suit, les mailles coupées sont référencées par l'indice $I = (i, j, k) \in \mathcal{I}$, représentant le triplet de coordonnées entières associé à la position spatiale $(x_i, y_j, z_k)$, centrée dans la maille considérée. L'ensemble $\mathcal{I}$ désigne l'ensemble des nœuds du maillage. Un nœud $J \in \mathcal{I}$ désigne une cellule voisine quelconque de la cellule coupée $I$. L'ensemble des voisins de $I$ est noté :

$$\mathcal{I}^I = \{J \in \mathcal{I} \mid J \neq I,\ \sigma_{IJ} \neq \varnothing\},$$

où $\sigma_{IJ} = \overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_J$ est la face commune entre les cellules fermées $\overline{\Omega}_I$ et $\overline{\Omega}_J$, avec $(I, J) \in \mathcal{I}^2$ et $J \neq I$.

Dans tous les développements suivants, les exposants $M$ et $m$ désignent respectivement les phases majoritaire et minoritaire présentes dans la maille diphasique $I$. L'indice $p$ fait référence à la phase considérée, tandis que $\Gamma$ identifie l'interface. Ainsi, les indices $p_I^M$ se réfèrent à la phase majoritaire dans la cellule $\Omega_I$ ($\alpha_{p_I^M,I} \geq 0,5$) et $p_I^m = \{p \in \{\ell, g\} \,|\, p \neq p_I^M\}$ à la phase minoritaire.

- $\Gamma_{IJ}$ désigne l'interface située entre la maille coupée $I$ et sa voisine $J$.
- $x_{IJ} = \|\mathbf{x}_I - \mathbf{x}_J\|$ est la distance entre les nœuds $I$ et $J$ des cellules voisines, avec $(I, J) \in \mathcal{I}^2$.
- $\theta_{IJ} = \frac{\|\mathbf{x}_{\Gamma_{IJ}} - \mathbf{x}_I\|}{x_{IJ}} = \frac{(\alpha(\mathbf{x}_{\Gamma_{IJ}}) - \alpha_I)}{(\alpha_J - \alpha_I)}$ est une mesure de la longueur normalisée comprise entre 0 et 1 ($0 \leq \theta \leq 1$). Elle indique la distance de l'interface située entre les nœuds $I$ et $J$, par rapport à $\mathbf{x}_I$.
- $\mathcal{N}_I^m = \{J \in \mathcal{I}^I \,|\, (\alpha_J - 0,5)(\alpha_I - 0,5) < 0$ ou $(\alpha_I = 0,5$ et $\alpha_J < 0,5)$ ou $(\alpha_J = 0,5$ et $\alpha_I < 0,5)\}$ est l'ensemble des nœuds voisins de $I$ tels que $\Omega_J$ est principalement rempli de la même phase minoritaire que $\Omega_I$.
- $\mathcal{N}_I^M = \{J \in \mathcal{I}^I \,|\, (\alpha_J - 0,5)(\alpha_I - 0,5) > 0$ ou $(\alpha_I = 0,5$ et $\alpha_J \geq 0,5)$ ou $(\alpha_J = 0,5$ et $\alpha_I \geq 0,5)\}$ est l'ensemble des nœuds voisins de $I$ tels que $\Omega_J$ est principalement rempli de la même phase majoritaire que $\Omega_I$. Si $\alpha = 0,5$, le nœud est supposé liquide.
- $\delta$ désigne le symbole de Kronecker, défini tel que $\delta_{p_I^M,p} = 1$ si $p = p_I^M$, et $\delta_{p_I^M,p} = 0$ sinon.

Les figures 5.2 et 5.3 illustrent les paramètres nécessaires à l'établissement du formalisme général du modèle numérique développé.

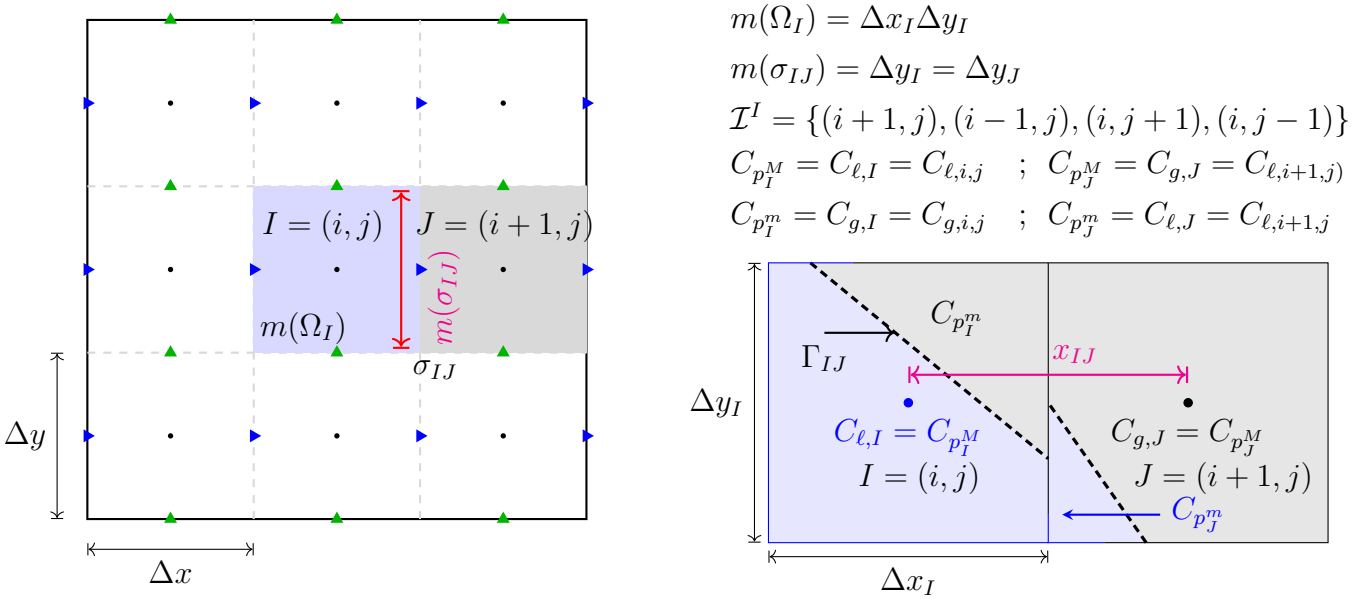



FIGURE 5.2 – Illustration des paramètres utilisés dans le formalisme général appliqué au traitement du terme de diffusion par la méthode Ghost-Fluid.

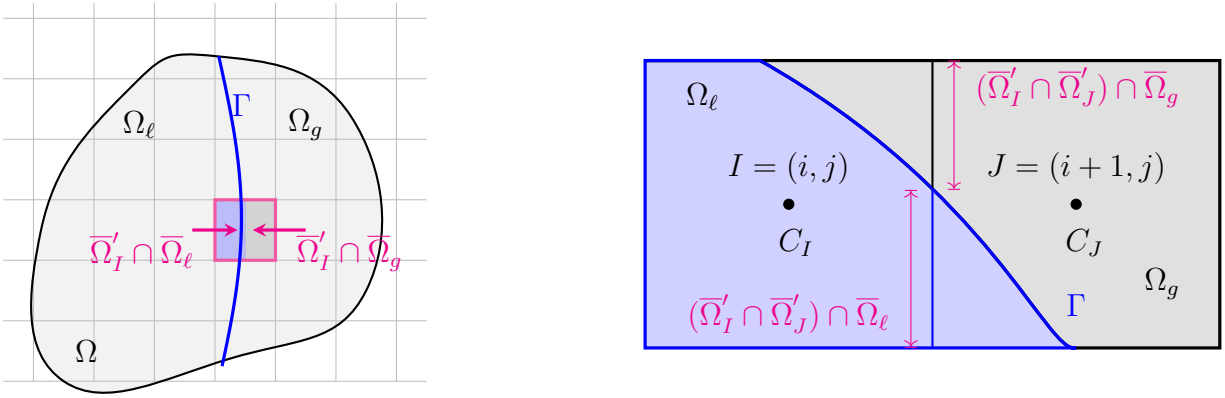



FIGURE 5.3 – Illustrations des intersections de domaines dans deux contextes : (gauche) domaine global avec interface, (droite) interface entre deux cellules.

Ces définitions sont employées pour établir les expressions généralisées des paramètres utilisés dans le modèle Ghost-Fluid appliqué au traitement du terme de diffusion du problème étudié, comme présenté ci-après.

**Définitions nécessaires à l'établissement du formalisme général**

L'approximation 1D de position de l'interface $\mathbf{x}_{\Gamma_{IJ}}$ est basée sur l'hypothèse que la localisation de l'interface correspond à la fraction volumique liquide $\alpha(\mathbf{x}_{\Gamma_{IJ}}) = 0,5$. En supposant une variation linéaire de la fraction volumique $\alpha(\mathbf{x})$ entre les mailles $I$ et $J \in \mathcal{N}_I^m$, l'approximation d'interface $\Gamma_{IJ}$ est le résultat de la translation de l'image de $\sigma_{IJ} = \overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_J$ par le vecteur,

$$\mathbf{x}_{\Gamma_{IJ}} = \mathbf{x}_{\sigma_{IJ}} + \left( \frac{\alpha(\mathbf{x}_{\Gamma_{IJ}}) - \alpha_I}{\alpha_J - \alpha_I} - \alpha(\mathbf{x}_{\Gamma_{IJ}}) \right) (\mathbf{x}_J - \mathbf{x}_I) \tag{5.9}$$

En considérant la distance adimensionnelle entre le nœud $I$ et l'interface $\Gamma_{IJ}$, et $C_{p,\Gamma_{IJ}}$ la concentration de l'espèce en phase $p$ à l'interface, alors les relations de sauts (5.5) et (5.6) peuvent être approximées par :

$$\begin{cases} D_{p_I^M} \dfrac{C_{p_I^M,\Gamma_{IJ}} - C_I}{\theta_{IJ} x_{IJ}} + D_{p_I^m} \dfrac{C_{p_I^m,\Gamma_{IJ}} - C_J}{(1-\theta_{IJ}) x_{IJ}} = 0 & \text{(5.10a)} \\ C_{g,\Gamma_{IJ}} = \mathrm{He}\ C_{\ell,\Gamma_{IJ}} & \text{(5.10b)} \end{cases}$$

Cela conduit à l'approximation de la concentration du liquide et du gaz à l'interface

$$\begin{cases} C_{\ell,\Gamma_{IJ}} = \dfrac{D_{p_I^M}(1-\theta_{IJ}) C_I + D_{p_I^m} \theta_{IJ} C_J}{D_{p_I^M}(1-\theta_{IJ})(\mathrm{He}\ \delta_{p_I^M,g} + \delta_{p_I^M,\ell}) + D_{p_I^m} \theta_{IJ} (\mathrm{He}\ \delta_{p_I^M,\ell} + \delta_{p_I^M,g})} & \text{(5.11a)} \\ C_{g,\Gamma_{IJ}} = \mathrm{He}\ C_{\ell,\Gamma_{IJ}} & \text{(5.11b)} \end{cases}$$

Avec le coefficient de diffusion massique à la face $D_{p_I^M,IJ}$ défini par la moyenne harmonique pondérée de $D_g$ et $D_\ell$ via l'expression (5.12) :

$$\frac{1}{D_{p_I^M,IJ}} = \frac{(1-\theta_{IJ}) \left( \mathrm{He} + \delta_{p_I^M,\ell}(1-\mathrm{He}) \right)}{D_{p_I^m}} + \frac{\theta_{IJ} \left( 1 + \delta_{p_I^M,\ell}(\mathrm{He}-1) \right)}{D_{p_I^M}} \tag{5.12}$$

Deux cas de figures sont déclinés, selon que la maille coupée est majoritairement liquide ou gaz, en fonction de la valeur de la fraction volumique $\alpha_I$ :

$$\begin{cases} \text{si } \alpha_I \geq 0.5,\ C_{\ell,\Gamma_{IJ}} = \frac{D_\ell(1-\theta_{IJ})C_I + D_g \theta_{IJ} C_J}{D_\ell(1-\theta_{IJ}) + D_g \theta_{IJ} \mathrm{He}} \\ \text{si } \alpha_I < 0.5,\ C_{\ell,\Gamma_{IJ}} = \frac{D_g(1-\theta_{IJ})C_I + D_\ell \theta_{IJ} C_J}{D_g(1-\theta_{IJ})\mathrm{He} + D_\ell \theta_{IJ}} \end{cases} \tag{5.13}$$

Ainsi que :

$$\begin{cases} \text{si } \alpha_I \geq 0.5,\ D_\ell \frac{C_{\ell,\Gamma_{IJ}} - C_I}{\theta_{IJ}\ x_{IJ}} = D_{\ell,IJ} \frac{C_J - \mathrm{He}\ C_I}{x_{IJ}},\ \text{avec } D_{\ell,IJ} = \frac{D_\ell\ D_g}{D_\ell\ (1-\theta_{IJ}) + D_g \theta_{IJ} \mathrm{He}} \\ \text{si } \alpha_I < 0.5,\ D_g \frac{C_{g,\Gamma_{IJ}} - C_I}{\theta_{IJ}\ x_{IJ}} = D_{g,IJ} \frac{\mathrm{He}\ C_J - C_I}{x_{IJ}},\ \text{avec } D_{g,IJ} = \frac{D_\ell\ D_g}{D_g(1-\theta_{IJ})\ \mathrm{He} + D_\ell\ \theta_{IJ}} \end{cases} \tag{5.14}$$

En se basant sur les définitions faites dans la partie précédente, on traite l'équation de diffusion de masse. Cette équation est intégrée dans le volume de contrôle $\Omega_I$,

$$\int_{\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p} \frac{\partial C_p}{\partial t} \, \mathrm{d}V = \int_{\partial(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p)} D_p \frac{\partial C_p}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma}} \, \mathrm{d}S \tag{5.15}$$

avec $\mathbf{n}_{I,\sigma}$ le vecteur unitaire normal sortant à $\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p$. Comme les deux fluides sont non miscibles et peuvent coexister dans un volume de contrôle $\Omega_I$, la contribution de chaque phase est sommée pour donner l'équation discrète. Avec une formulation temporelle implicite, $\forall I \in \mathcal{I}$,

$$\left( \sum_{p \in \{\ell, g\}} \int_{\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p} \frac{\partial C_p}{\partial t} \, \mathrm{d}V \right)_{\text{approx}}^{(n+1)} = \left( \sum_{p \in \{\ell, g\}} \int_{\partial(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p)} D_p \frac{\partial C_p^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma}} \, \mathrm{d}S \right)_{\text{approx}} \tag{5.16}$$

où l'indice $\bullet_{\text{approx}}$ désigne des approximations discrètes de chaque terme. L'approximation du flux de masse est divisée en deux contributions (5.17) : Le premier terme de l'équation de droite est le flux massique monophasique standard, évalué sur les faces des mailles $I$ et $J$, $J \in \mathcal{N}_I^M$ majoritairement remplies de la même phase, tandis que le second relie les nœuds adjacents appartenant à des phases différentes, caractérisé par un passage d'interface entre les deux nœuds $I$ et $J$.

$$\begin{aligned} \left( \sum_{p \in \{\ell, g\}} \int_{\partial(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p)} D_p \frac{\partial C_p^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma}} \, \mathrm{d}S \right)_{\text{approx}} &= \sum_{J \in \mathcal{N}_I^M} m(\sigma_{IJ}) D_{p_I^M} \frac{C_J^{(n+1)} - C_I^{(n+1)}}{x_{IJ}} + \\ &\sum_{J \in \mathcal{N}_I^m} \left( \sum_{p \in \{\ell, g\}} \int_{(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_J) \cap \overline{\Omega}_p} D_p \frac{\partial C_p^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma}} \, \mathrm{d}S \right)_{\text{approx}} \end{aligned} \tag{5.17}$$

Pour exprimer cette dernière intégrale, la dérivée première est évaluée à la face commune entre $\bar{\Omega}_I$ et $\bar{\Omega}_J$ en utilisant l'approche Ghost-Fluid. Celle-ci suggère d'exprimer les dérivées sur les faces séparant les nœuds adjacents $I$ et $J$, appartenant à des phases distinctes, à partir de variables continues définies dans une phase fantôme, où la continuité des champs est imposée artificiellement (Fig 5.1). Une telle démarche permet de préserver une représentation phasique d'une part, et d'assurer la dérivabilité des variables en palliant la discontinuité d'autre part :

$$\left( \sum_{p \in \{\ell, g\}} \int_{(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_J) \cap \overline{\Omega}_p} D_p \frac{\partial C_p^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma}} \, \mathrm{d}S \right)_{\text{approx}} = m(\sigma_{IJ}) \overline{D}_{IJ} \frac{C_{p_J^M, I}^{(n+1)} - C_I^{(n+1)}}{x_{IJ}} \tag{5.18}$$

avec $\overline{D}_{IJ}$ un coefficient de diffusion harmonique classique à l'interface $\Gamma_{IJ}$

$$\overline{D}_{IJ} = \frac{D_l D_g}{\theta_{IJ} D_{p_I^m} + (1 - \theta_{IJ}) D_{p_I^M}} \tag{5.19}$$

$C_{p_J^M,I}$ désigne la variable fantôme de $C_{p_J^M} \in \Omega_J$ (avec $C_{p_J^M} = C_J$), exprimée de manière fictive dans $\Omega_I$ telle que :

$$C_{p_J^M,I} = C_{p_J^M} - a \tag{5.20}$$

où $a$ est le saut reformulé à l'interface donné par (5.7), et généralisé comme suit :

$$a = C_{\ell,\Gamma_{IJ}}(\mathrm{He} - 1) \tag{5.21}$$

avec $C_{\ell,\Gamma_{IJ}}$ est la concentration interfaciale exprimée coté liquide, donnée par (5.11b). Après quelques calculs, cette dernière expression donne :

$$\begin{aligned} &\left( \sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_J)\cap\overline{\Omega}_p} D_p \frac{\partial C_p^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma}} \,\mathrm{d}S \right)_{\text{approx}} = \\ &m(\sigma_{IJ})\, D_{p_I^M,IJ} \times \frac{C_J^{(n+1)} \left(\delta_{p_I^M,\ell} + \mathrm{He}\,\delta_{p_I^M,g}\right) - C_I^{(n+1)} \left(\delta_{p_I^M,\ell} + \mathrm{He}\,\delta_{p_I^M,g}\right)}{x_{IJ}} \end{aligned} \tag{5.22}$$

avec le coefficient de diffusion à la face $D_{p_I^M,IJ}$ défini par la combinaison harmonique pondérée de $D_g$ et $D_\ell$ via l'expression (5.12).

**Remarque.** Il convient de noter qu'une expression identique du flux massique Eq. (5.22) est également obtenue avec une approche Cut-Cell directionnelle.

#### 5.2.1.2 Application du formalisme général au cas particulier

Pour illustrer le formalisme général présenté ci-dessus et simplifier la démonstration, nous retenons le cas particulier montré sur la figure 5.4. La configuration considérée correspond à une maille coupée par une interface, majoritairement occupée par la phase liquide. La phase complémentaire gazeuse y est donc minoritaire.

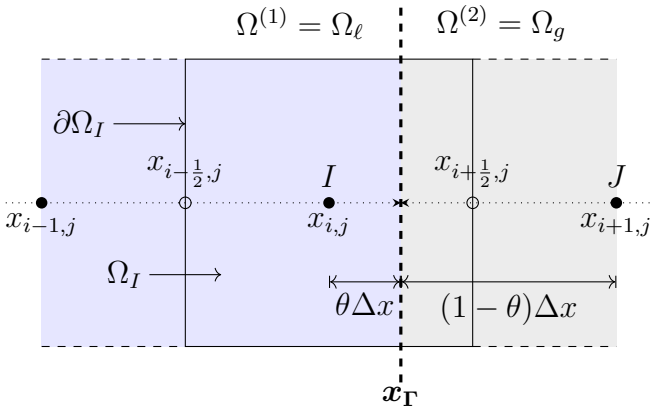



FIGURE 5.4 – Stencil de discrétisation

Le formalisme général applique de manière directionnelle des discrétisations dans chacune des directions. Dans cet exemple, nous détaillerons la discrétisation du flux de diffusion dans la direction $x$. L'extension en direction $y$ et $z$ se fait par permutation d'indices. Enfin, pour alléger la notation, seul l'indice $i$ de la direction considérée est conservé, et l'exposant $(n+1)$ indiquant l'instant courant est omis dans les développements suivants. En considérant un maillage cartésien régulier $(x_i)_{i=1,\dots,N}$ de pas $\Delta x$, une discrétisation centrée est appliquée en chaque point $x_i$, avec $C_{p,i} = C_p(x_i, t)$, $p \in \{\ell, g\}$, comme illustré à la figure 5.1.

L'interface étant localisée à des distances $\theta\Delta x$ et $(1-\theta)\Delta x$ des nœuds $i$ et $i+1$ adjacents, la continuité du flux diffusif à travers celle-ci, imposée par la deuxième relation de saut (5.6), est discrétisée de la manière suivante :

$$D_g \left( \frac{C^{(2)}_{g,i+1} - C^{(2)}_{g,\Gamma}}{(1-\theta)\Delta x} \right) - D_\ell \left( \frac{C^{(1)}_{\ell,\Gamma} - C^{(1)}_{\ell,i}}{\theta \Delta x} \right) = 0 \tag{5.23}$$

où $C^{(1)}_{\ell,i}$ et $C^{(2)}_{g,i+1}$ sont les concentrations du liquide et du gaz exprimées dans leurs sous-domaines respectifs $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$ en $i$ et $i+1$. $\theta$ se réfère à la distance normalisée entre l'interface $\Gamma$ et la position discrète $x_i \in \Omega^{(1)}$ (avec $\Omega^{(1)} = \Omega_\ell$) à gauche de l'interface $\Gamma$ :

$$\theta \equiv \frac{|x_i - x_\Gamma|}{\Delta x} \tag{5.24}$$

En substituant la relation de saut donnée par (5.5), il vient,

$$D_g \left( \frac{C^{(2)}_{g,i+1} - \mathrm{He}\, C^{(1)}_{\ell,\Gamma}}{(1-\theta)\Delta x} \right) - D_\ell \left( \frac{C^{(1)}_{\ell,\Gamma} - C^{(1)}_{\ell,i}}{\theta \Delta x} \right) = 0 \tag{5.25}$$

Ceci nous permet d'isoler la concentration au niveau de l'interface $C^{(1)}_{\ell,\Gamma}$ évaluée dans le sous domaine $\Omega^{(1)}$ et de l'exprimer par :

$$C^{(1)}_{\ell,\Gamma} = \frac{\theta D_g C^{(2)}_{g,i+1} + (1-\theta) D_\ell C^{(1)}_{\ell,i}}{\mathrm{He}\,\theta D_g + (1-\theta) D_\ell} \tag{5.26}$$

En adoptant la définition de la variable d'interface $C^{(1)}_{\ell,\Gamma}$ (5.26), les flux de diffusion au niveau de l'interface (5.23), exprimés dans chacun des sous domaines $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$, se réécrivent comme suit :

$$\begin{aligned} D_\ell \left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|^{(1)}_\Gamma &= D_\ell \frac{C^{(1)}_{\ell,\Gamma} - C^{(1)}_{\ell,i}}{\theta \Delta x} &&= \hat{D} \frac{C^{(2)}_{g,i+1} - C^{(1)}_{\ell,i}}{\Delta x}, \\ D_g \left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|^{(2)}_\Gamma &= D_g \frac{C^{(2)}_{g,i+1} - \mathrm{He}\, C^{(1)}_{\ell,\Gamma}}{(1-\theta)\Delta x} &&= \hat{D} \frac{C^{(2)}_{g,i+1} - C^{(1)}_{\ell,i}}{\Delta x}, \end{aligned} \tag{5.27}$$

où $\hat{D}$ est calculé avec une moyenne harmonique modifiée pour le coefficient de diffusion, exprimée comme suit :

$$\hat{D} = \frac{D_g D_\ell}{D_\ell\,(1-\theta) + D_g \theta \mathrm{He}} \tag{5.28}$$

La méthode Ghost-Fluid prend ici tout son intérêt pour la formulation des flux traversants les faces des mailles, en particulier les mailles diphasiques. C'est notamment le cas de la maille centrée sur le nœud $i$, illustrée dans cet exemple (Fig 5.4), où le bilan de flux diffusif est donné par :

$$[\nabla \cdot (D\nabla C)]_i^{(1)} = \frac{1}{\Delta x}\left[(D\nabla C)\,|_{i+\frac{1}{2}}^{(2)} - (D\nabla C)\,|_{i-\frac{1}{2}}^{(1)}\right] \tag{5.29}$$

L'expression du flux sur la face en $i+\frac{1}{2}$, située entre les nœuds $i$ et $i+1$ entre lesquels l'interface est positionnée, conduit naturellement à introduire des variables discontinues $C_{\ell,i}^{(1)}$ et $C_{g,i+1}^{(2)}$. D'où la pertinence de la méthode, garantissant que les variables discrètes utilisées dans le bilan de flux proviennent exclusivement du sous-domaine où la dérivée est évaluée, en l'occurrence $\Omega^{(2)}$. Pour cela, la notion de variables fantômes prolongeant le champ de concentration de part et d'autre de l'interface est introduite, permettant d'éviter la discontinuité apparente des variables lors de l'expression du flux. Ainsi, il vient :

$$D\frac{dC}{dx}\bigg|_{i+\frac{1}{2}}^{(2)} = \frac{\bar{D}}{\Delta x}\left(C_{g,i+1}^{(2)} - C_{\ell,i}^{(2)}\right), \tag{5.30}$$

où le coefficient de diffusion effectif $\overline{D}$ donné par (5.19), se réduit dans ce cas à :

$$\bar{D} = \frac{D_g D_\ell}{D_\ell\,(1-\theta) + D_g \theta}. \tag{5.31}$$

La variable $C_{\ell,i}^{(2)}$ étant la variable fantôme déterminée à partir de la variable réelle $C_{\ell,i}^{(1)}$ en appliquant le saut de valeur donné par :

$$\begin{aligned} C_{\ell,i}^{(2)} &= C_{\ell,i}^{(1)} + a \\ &= C_{\ell,i}^{(1)} + (\mathrm{He}-1)\frac{\theta D_g C_{g,i+1}^{(2)} + (1-\theta) D_\ell C_{\ell,i}^{(1)}}{\mathrm{He}\,\theta D_g + (1-\theta) D_\ell} \end{aligned} \tag{5.32}$$

Il vient ainsi,

$$
\begin{aligned}
D\frac{dC}{dx}\bigg|_{i+\frac{1}{2}}^{(2)} &= \frac{\bar{D}}{\Delta x}\left(C_{g,i+1}^{(2)} - \left[C_{\ell,i}^{(1)} + (\mathrm{He}-1)\frac{\theta D_g C_{g,i+1}^{(2)} + (1-\theta)D_\ell C_{\ell,i}^{(1)}}{\mathrm{He}\,\theta D_g + (1-\theta)D_\ell}\right]\right). \\
&= \frac{\bar{D}}{\Delta x}\frac{\left[(1-\theta)D_\ell + \theta D_g\right]}{\left[\mathrm{He}\,\theta D_g + (1-\theta)D_\ell\right]}\left(C_{g,i+1}^{(2)} - \mathrm{He}\,C_{\ell,i}^{(1)}\right) \\
&= \frac{\hat{D}}{\Delta x}\left(C_{g,i+1}^{(2)} - \mathrm{He}\,C_{\ell,i}^{(1)}\right),
\end{aligned}
\tag{5.33}
$$

Finalement, l'écriture discrète du bilan du flux dans la maille centrée sur le nœud $i$ est donnée telle que :

$$
[\nabla\cdot(D\nabla C)]_i^{(1)} = \frac{1}{\Delta x}\left[\frac{\hat{D}}{\Delta x}\left(C_{g,i+1}^{(2)} - \mathrm{He}\,C_{\ell,i}^{(1)}\right) - \frac{D_\ell}{\Delta x}\left(C_{\ell,i}^{(1)} - C_{\ell,i-1}^{(1)}\right)\right]. \tag{5.34}
$$

avec $\hat{D}$ est par l'expression (5.28).

### 5.2.2 Résultats de validation du modèle de diffusion pure

Dans le but de valider l'approche à deux-champs développée dans ce travail, sa précision est évaluée et comparée à une solution analytique [41] (voir annexe D), ainsi qu'à la solution du modèle à 1-fluide. La comparaison porte à la fois sur la solution du champ de concentration et sur l'évaluation du nombre de Sherwood. La référence analytique est donnée comme suit :

— Dans la phase gazeuse, en coordonnées cylindriques, la solution est donnée en fonction du rayon r :

$$
C_g(r,t) = \frac{4C_{g,0}D_g D_\ell^2\mathrm{He}}{\pi^2 R_0}\int_0^\infty \exp(-D_g u^2 t)\frac{J_0(ur)J_1(uR_0)}{u^2[\Phi^2(u)+\Psi^2(u)]}\,\mathrm{d}u \tag{5.35}
$$

— et dans la phase liquide,

$$
C_\ell(r,t) = \frac{2C_{g,0}D_g\sqrt{D_\ell}\mathrm{He}}{\pi}\int_0^\infty \exp(-D_g u^2 t)\frac{J_1(uR_0)[J_0(\mathcal{D}ur)\Phi(u) - Y_0(\mathcal{D}ur)\Psi(u)]}{u[\Phi^2(u)+\Psi^2(u)]}\,\mathrm{d}u \tag{5.36}
$$

avec $\mathcal{D} = \sqrt{D_g/D_\ell}$ et $\Phi$ et $\Psi$ fonctions définies par :

$$
\begin{aligned}
\Psi(u) &= \mathrm{He}D_g\sqrt{D_\ell}J_1(uR_0)J_0(uDR_0) - D_\ell\sqrt{D_g}J_0(uR_0)J_1(uDR_0) \\
\Phi(u) &= \mathrm{He}D_g\sqrt{D_\ell}J_1(uR_0)Y_0(uDR_0) - D_\ell\sqrt{D_g}J_0(uR_0)Y_1(uDR_0)
\end{aligned}
\tag{5.37}
$$

où $J_\alpha$ et $Y_\alpha$ désignent respectivement les fonctions de Bessel du premier et du second ordre. Les conditions initiales du champ de concentration dans les deux phases sont :

$C_\ell(t=0,r) = C_{\ell,0}(r) = 0$ et $C_g(t=0,r) = C_{g,0}$. Les conditions aux limites sont données par : $r \to 0$ : $\partial_r C_g|_{r\to 0} = 0$, et une concentration liquide nulle lorsque $r \to \infty$ : $C_{\ell,\infty} = 0$. À l'interface gaz/liquide, la continuité du flux de Fick donne $-D_g \partial_r C_g|_\Gamma = -D_\ell \partial_r C_\ell|_\Gamma$ et le saut de valeurs est donné par la condition de Henry : $C_{g,\Gamma} = \mathrm{He}\, C_{\ell,\Gamma}$.

Dans ce test de validation, la configuration étudiée consiste en la diffusion instationnaire à travers l'interface d'une bulle statique ($2D$), entourée par un liquide au repos ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$). Le domaine de calcul illustré sur la figure 5.5 est un carré $[-20\ \mathrm{m}, 20\ \mathrm{m}]^2$, au sein duquel un disque de dimension $R_0/L = 0.025$, rempli de la phase gazeuse, est centré en $(x_0, y_0) = (0+\varepsilon,\ 0+\varepsilon)$. Ici, $\varepsilon$ désigne une petite perturbation introduite afin d'éviter le cas particulier où l'interface coïnciderait exactement avec le centre d'une maille. Les conditions initiales sont les mêmes que celles considérées pour l'établissement de la solution analytique, avec $C_g(t=0,r) = C_{g,0} = 1$. En revanche, des conditions aux limites de Neumann sont imposées sur les bords du domaine. Ces conditions ne sont pas strictement compatibles avec celles de la référence analytique, ce qui justifie le choix d'un domaine de calcul suffisamment grand par rapport au temps final de simulation ($t_f\ D_\ell/R_0^2 \approx 0.56$), de sorte que la couche limite autour de l'interface gaz-liquide n'interagisse pas sensiblement avec les frontières. Le domaine carré $[-4\ \mathrm{m}, 4\ \mathrm{m}]^2$, centré dans le domaine global, est caractérisé par un maillage structuré et uniforme dont la résolution varie, telle que : $\Delta x = d_0/N$ avec $N$ variant de 8 à 512. Les deux fluides sont caractérisés par un rapport de coefficients de diffusivité $D^* = \dfrac{D_g}{D_\ell} = 100$, avec $D_\ell = 0.17416\ \mathrm{m}^2/\mathrm{s}$, ainsi qu'une constante de saut $\mathrm{He} = 30$.

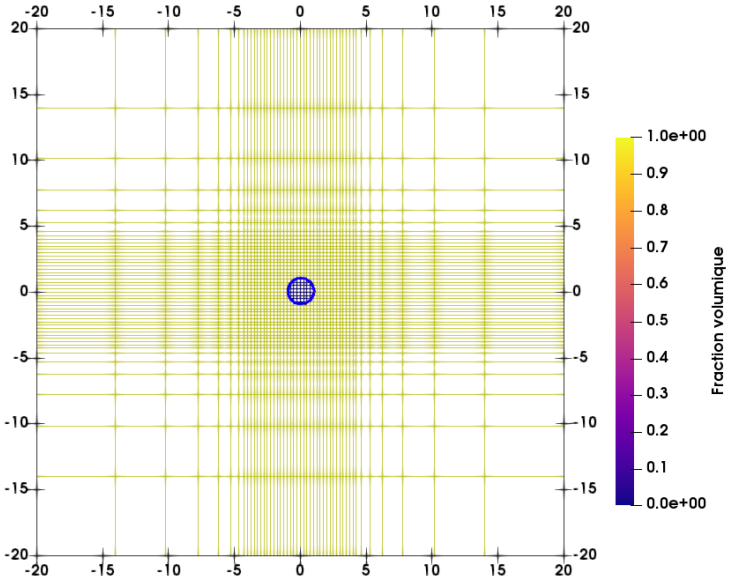



FIGURE 5.5 – Illustration de la géométrie et du maillages du domaine de calcul pour une résolution $d_0/\Delta x = 8$.

La figure 5.6 présente les solutions numériques du champ de concentration obtenues pour une résolution de $d_0/\Delta x = 8$, en utilisant les deux approches numériques, à 1-fluide et à 2-champs, comparées dans cette étude. La solution analytique exacte est également représentée à titre de référence. Une première observation montre que, dans les mailles monophasiques, loin de l'interface, les deux modèles (à 1 et 2 champs) fournissent des résultats similaires et proches de la référence analytique. En revanche, au voisinage de l'interface, la variable de mélange $C$ produite par le modèle à 1-fluide révèle sa principale faiblesse : l'étalement de l'information autour des mailles contenant une interface. Cela génère des valeurs intermédiaires de part et d'autre de l'interface, qui s'éloignent de la solution analytique. Cette perte de fidélité physique à l'interface conduit à des erreurs significatives et met en évidence les limites du modèle à 1-fluide par rapport au modèle à deux-champs. En effet, ce dernier donne accès directement aux solutions phasiques de chaque côté de l'interface, respecte la discontinuité naturelle de la solution et évite la génération de valeurs artificiellement intermédiaires, ce qui le rapproche davantage de la solution exacte. Afin de corriger ce biais inhérent au modèle à 1-fluide et permettre une

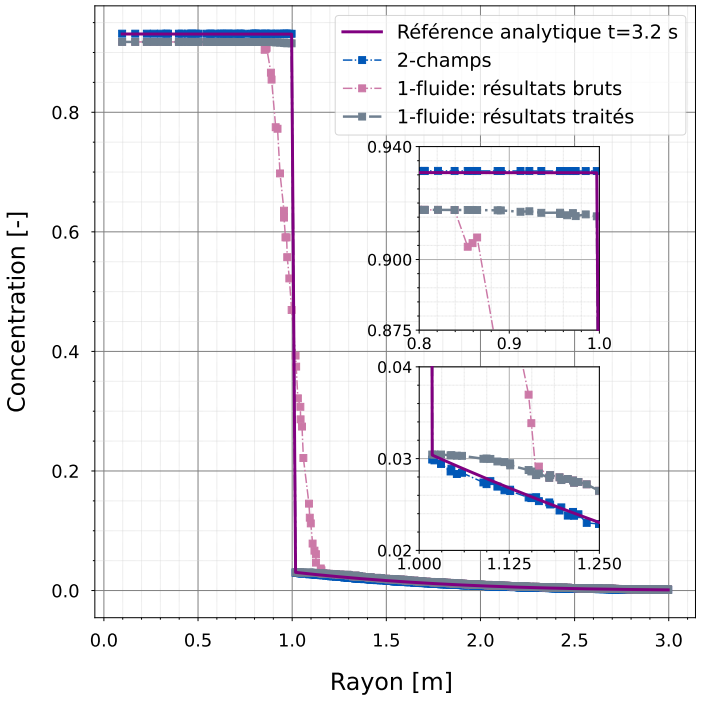



FIGURE 5.6 – Profil de concentration en fonction du rayon pour un mode de transfert extérieur : comparaison des résultats numériques des modèles à deux champs et à 1-fluide ($1F$), bruts et traités, avec la solution exacte pour une résolution $d_0/\Delta x = 8$.

comparaison équitable entre les deux approches, on reconstruit sa solution en rétablissant les variables phasiques à partir des variables de mélange. Cette reconstruction s'appuie sur la définition de la variable de mélange $C = \alpha C_\ell + (1-\alpha)C_g$ et de la relation de saut

$C_g = \mathrm{He}\, C_\ell$, selon les relations suivantes :

$$\begin{cases} C_\ell = \dfrac{C}{\alpha + (1-\alpha)\mathrm{He}} \\ C_g = \dfrac{C}{\alpha/\mathrm{He} + (1-\alpha)} \end{cases} \tag{5.38}$$

Ces solutions reconstruites sont globalement en meilleur accord avec la solution analytique. Néanmoins, une légère sous-estimation par rapport à l'approche à 2-fluides est observée, aussi bien en phase gazeuse (à gauche) qu'en phase liquide (à droite), comme l'illustre la courbe grise de la figure 5.6. Elles permettent toutefois de réduire l'écart entre la solution issue du modèle et la valeur exacte.

#### 5.2.2.1 Étude de convergence sur le champ de concentration

La précision du modèle à deux-champs, ainsi que celle du modèle à 1-fluide reconstruit, est évaluée au moyen du calcul de l'erreur relative en norme $\mathrm{L}_2$ sur le champ de concentration, notée $\|C\|_{2,r}$ et définie par :

$$\|C\|_{2,r} = \sqrt{\frac{\displaystyle\sum_{I\in\mathcal{I}\,\big|\,\|\mathbf{x}_I-\mathbf{x}_0\|_2<3} m(\Omega_I)\Big[C_I - C_{\mathrm{exact}}(\mathbf{x}_I)\Big]^2}{\displaystyle\sum_{I\in\mathcal{I}\,\big|\,\|\mathbf{x}_I-\mathbf{x}_0\|_2<3} m(\Omega_I)\Big[C_{\mathrm{exact}}(\mathbf{x}_I)\Big]^2}} \tag{5.39}$$

où $C_I$ désigne la solution dans la phase ($p = g$ ou $\ell$) majoritaire de la maille considérée, et $C_{\mathrm{exact}}$ la solution analytique correspondante au point $\mathbf{x}_I$. La sommation discrète est limitée aux nœuds de cellule dont les distances au centre de la bulle ne dépassent pas 3.

La figure 5.7 présente l'évolution du niveau d'erreur relative, notée $\|C\|_{2,r}$, obtenue par les deux approches étudiées : 1-fluide et 2 champs. Les résultats montrent que, d'une part, les deux approches convergent à l'ordre 1 globalement. D'autre part, il est constaté que l'approche numérique proposée dans ce travail fournit une solution d'au moins un ordre de grandeur plus précise que celle du modèle de mélange à 1-fluide, et ce, sur l'ensemble des maillages considérés.

#### 5.2.2.2 Étude de convergence sur le nombre de Sherwood

Le nombre de Sherwood ($Sh$) mesure le flux diffusif échangé entre deux phases et représente un indicateur de l'efficacité des transferts de masse. Il est donc essentiel d'examiner la capacité des modèles proposés à l'estimer correctement. À cette fin, les valeurs numériques issues de ces deux dernières approches sont comparées à la référence analytique

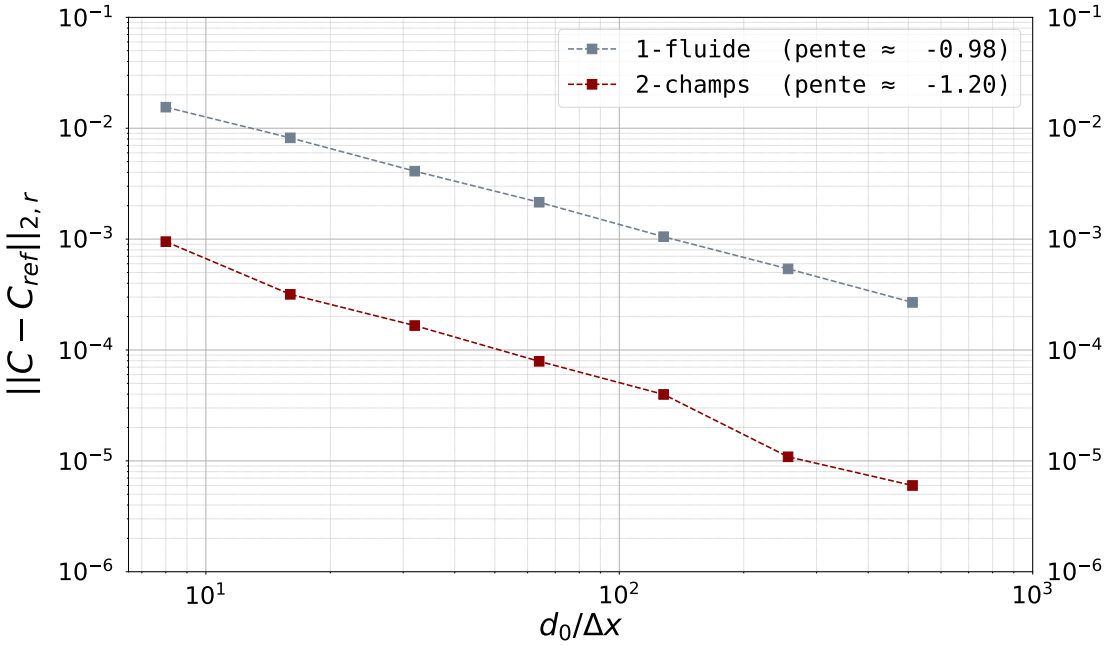



FIGURE 5.7 – Résultats de convergence du champ de concentration obtenu par les deux approches numériques : à 1-fluide et à 2-fluides

($Sh_{\text{ref}}$). Cette dernière a été déterminée à partir du flux diffusif analytique obtenu par dérivation de la solution donnée par [41] (voir annexe D), et est donnée par les relations (5.35) et (5.36).

De manière générale, le nombre de Sherwood s'exprime de façon analogue au nombre de Nusselt en thermique $Sh = \frac{k_p d_0}{D_p}, \quad p \in \{\ell, g\}$, où $d_0 = 2R_0$ est la longueur caractéristique et $k_p$ le coefficient global de transfert de masse dans la phase $p$. Dans ce travail, nous adoptons la convention d'exprimer le nombre de Sherwood dans la phase extérieure, correspondant ici à la phase liquide. Le coefficient de transfert de masse est alors défini par :

$$k_\ell = \frac{\langle D_\ell \nabla C_\ell \cdot \mathbf{n} \rangle}{\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle - C_{\ell,\infty}} \tag{5.40}$$

avec $\langle \bullet \rangle$ représentant une moyenne spatiale, qui est utilisée pour obtenir les quantités moyennes à l'interface du flux de Fick et de la concentration dans le liquide.

Le calcul du flux de diffusion au numérateur du nombre de Sherwood est basé sur une approximation continue. En appliquant le théorème de Reynolds donné par (3.4), on écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\int_{\Omega_p} C_p \,\mathrm{d}V &= \frac{\partial}{\partial t}\int_{\Omega_p} C_p \,\mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega_p} C_p \underbrace{(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_\Gamma)\cdot\mathbf{n}_p}_{=0 \text{ car } \mathbf{u}=\mathbf{u}_\Gamma} \mathrm{d}S \\ &= \frac{\partial}{\partial t}\int_{\Omega_p} C_p \,\mathrm{d}V \end{aligned} \tag{5.41}$$

De plus, d'après l'équation (3.16) (page 72), le flux de masse s'exprime également sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{\Omega_p} C_p \,\mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega_p} D_p \nabla C_p \cdot \mathbf{n}_p \,\mathrm{d}S \tag{5.42}$$

Ainsi, le flux de Fick moyen à travers l'interface, défini par le vecteur normal extérieur $\mathbf{n} = \mathbf{n}_p$, s'écrit :

$$\begin{aligned}\langle D_\ell \nabla C_\ell \cdot \mathbf{n}\rangle := \frac{1}{S_\Gamma}\int_{S_\Gamma} D_\ell \nabla C_\ell \cdot \mathbf{n} \,\mathrm{d}S &= -\frac{1}{S_\Gamma}\int_{S_\Gamma} D_g \nabla C_g \cdot \mathbf{n} \,\mathrm{d}S \\ &= -\frac{1}{S_\Gamma}\frac{\partial}{\partial t}\int_{\Omega_g} C_g \,\mathrm{d}V,\end{aligned} \tag{5.43}$$

où $S_\Gamma$ est l'aire interfaciale. En pratique, elle est évaluée numériquement à partir des plans PLIC de la fonction VOF. En supposant que la concentration dans le liquide $C_{\ell,\infty}$ est nulle loin de l'interface, le nombre de Sherwood s'écrit finalement :

$$Sh = \frac{2R}{D_\ell}\frac{1}{S_\Gamma \langle C_{\ell,\Gamma}\rangle}\frac{\partial}{\partial t}\int_{\Omega_g} C_g \,\mathrm{d}V, \tag{5.44}$$

où la concentration interfaciale liquide $\langle C_{\ell,\Gamma}\rangle$ est évaluée par intégration sur le contour de la bulle à partir de la variable d'interface, donnée par (5.11b) dans le modèle à deux champs. Dans le modèle à 1-fluide, cette concentration interfaciale, n'étant pas directement définie, elle est remplacée par une variable phasique reconstruite dans la phase liquide des mailles mixtes.

Enfin, pour ce cas particulier de régime de transfert extérieur, où la concentration gazeuse est quasi uniforme dans la bulle, une seconde estimation de la concentration interfaciale est possible. Comme proposé par [47], elle peut être approchée par la concentration moyenne dans la bulle, ramenée côté liquide en la divisant par la constante de Henry, selon l'approximation suivante :

$$\langle C_{\ell,\Gamma}\rangle = \frac{1}{\mathrm{He}}\langle C_{g,\Gamma}\rangle \approx \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{1}{\Omega_g}\int_{\Omega_g} C_g \,\mathrm{d}V \tag{5.45}$$

où $C_{g,\Gamma}$ désigne la concentration interfaciale côté gaz. Cette approximation n'est valable que si la diffusion à l'intérieur de la bulle est nettement plus élevée que dans la phase extérieure, soit $D_g \gg D_\ell$ dans notre cas.

Avant d'aborder l'analyse de la convergence, l'évolution temporelle du nombre de Sherwood ($Sh$) pour les deux approches de résolution est illustrée dans la figure 5.8. Les résultats de chacune sont confrontés à la référence analytique pour différents niveaux de

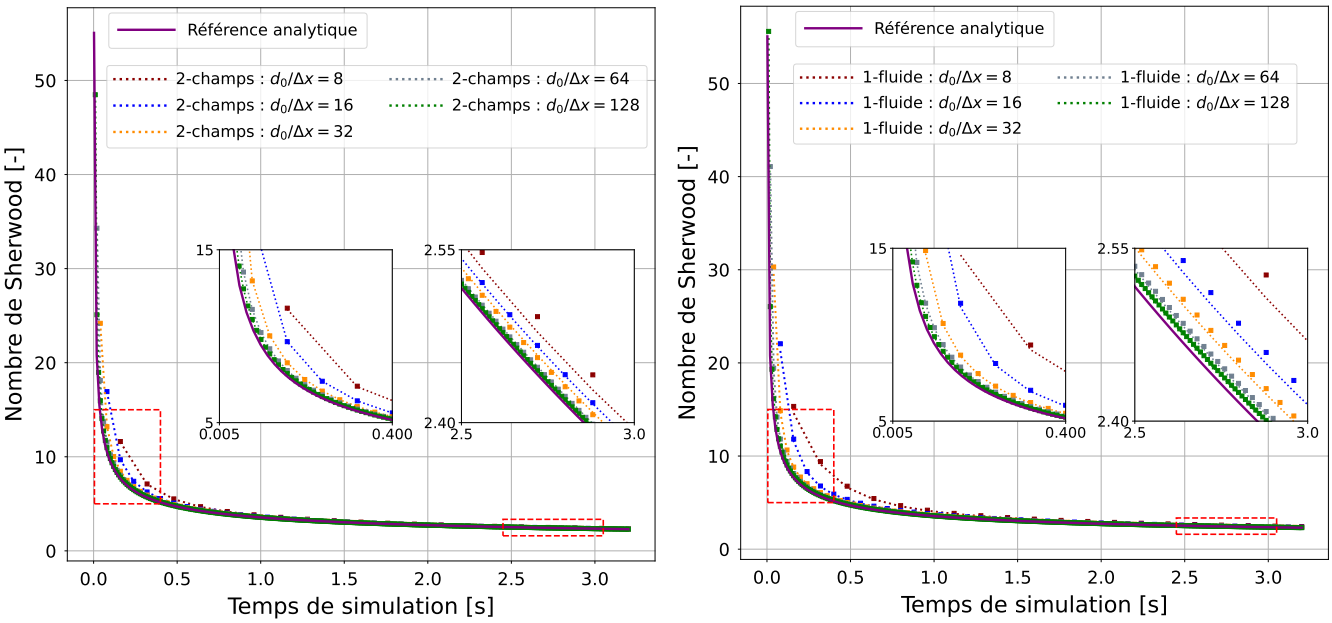



FIGURE 5.8 – Évolution temporelle du nombre de Sherwood pour $d_0/\Delta x = 8$ à 256 d'une bulle en translation uniforme : modèles 2-fluides (a) et 1-fluide (b). Les traits discontinus correspondent au calcul avec le dénominateur $C_g/\mathrm{He}$, et les symboles carrés au calcul avec le dénominateur $\langle C_{\Gamma,\ell} \rangle$.

résolution spatiale, compris entre $d_0/\Delta x = 8$ et 128. On y constate que les deux approches numériques reproduisent une solution conforme à la référence analytique, avec une précision croissante à mesure que le maillage est fin.

Comme pour le champ de concentration, la précision des deux approches numériques proposées pour l'estimation du nombre de Sherwood $Sh$ est évaluée grâce à une étude de convergence. L'analyse repose sur le calcul de l'erreur relative entre le nombre de Sherwood obtenu numériquement et sa valeur analytique exacte $\varepsilon_{Sh} = |Sh_{\mathrm{num}} - Sh_{\mathrm{ref}}|/Sh_{\mathrm{ref}}$.

Les résultats obtenus sont illustrés dans la figure 5.9 et montrent que les deux approches convergent avec un ordre proche de 1, avec une meilleure précision constatée pour l'approche à 2-champs développée ici. Cette dernière permet d'améliorer les résultats du modèle à 1-fluide d'au moins une décade. On peut noter cependant que la convergence est moins monotone que celle du modèle 1-fluide.

### 5.2.3 Traitement du terme d'advection

Le modèle de la partie diffusion étant établi et validé, la modélisation de la partie advection du problème étudié est à présent abordée. Un schéma de transport compatible avec l'approche GFM respectant la physique discontinue caractérisant le problème traité, est

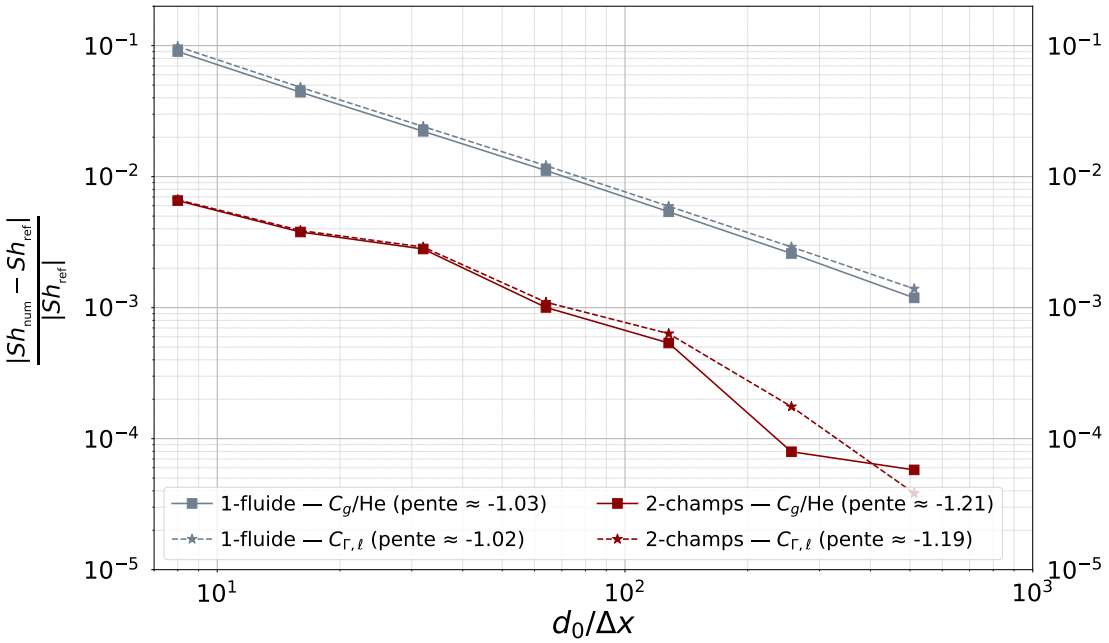



FIGURE 5.9 – Résultats de convergence du nombre de Sherwood ($Sh$) obtenu par les deux approches numériques : à 1-fluide et à 2-fluides

mis en place. Pour ce faire, les mêmes idées que celles employées pour la partie diffusion sont utilisées afin de discrétiser le terme advectif de l'équation (5.4). Ainsi, nous élaborerons un modèle de transport qui s'aligne naturellement avec la représentation discontinue des champs discrets de concentration à l'interface.

Comme le volume de contrôle $\Omega_I$ peut être mixte, composé de deux sous-domaines $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$, l'intégration spatiale sur ce volume est décomposée en deux contributions correspondant aux bilans des flux advectifs dans chacun des sous-domaines. Cette décomposition permet d'incorporer correctement la présence de l'interface.

$$\sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{\overline{\Omega}_I\cap\overline{\Omega}_p} \frac{\partial C_p}{\partial t}\,\mathrm{d}V = -\sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{\overline{\Omega}_I\cap\overline{\Omega}_p} \nabla\cdot\left(\mathbf{u}C_p\right)\mathrm{d}V \tag{5.46}$$

En combinant le théorème de Reynolds et le théorème de la divergence, il vient :

$$\sum_{p\in\{\ell,g\}} \frac{d}{dt}\int_{\overline{\Omega}_I\cap\overline{\Omega}_p} C_p\,\mathrm{d}V = -\sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{\partial(\overline{\Omega}_I\cap\overline{\Omega}_p)} C_p(\mathbf{u}_r\cdot\mathbf{n})\mathrm{d}S \tag{5.47}$$

où $\mathbf{u}_r = \mathbf{u} - \mathbf{u}_b$ est la vitesse relative du fluide par rapport à la vitesse $\mathbf{u}_b$ du bord du volume $\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p$.

De manière analogue au terme de diffusion, le schéma de transport mis en place repose sur une approche directionnelle. En considérant le stencil représenté sur l'illustration de

gauche de la figure 5.10, la discrétisation du terme d'advection se fait dans la direction $x$ dans la maille $I$ traversée par l'interface en $x_\Gamma$ délimitant les sous-domaines $\Omega_1$ et $\Omega_2$. Afin d'alléger les expressions, les indices associés aux directions non-considérées, ainsi que l'exposant $n+1$ désignant l'instant courant de la résolution, seront omis dans les développements qui suivent.

La configuration de la maille $I$ coupée par l'interface, considérée dans cet exemple, correspond à une maille majoritairement remplie par la phase liquide (voir fig 5.10). Le bilan

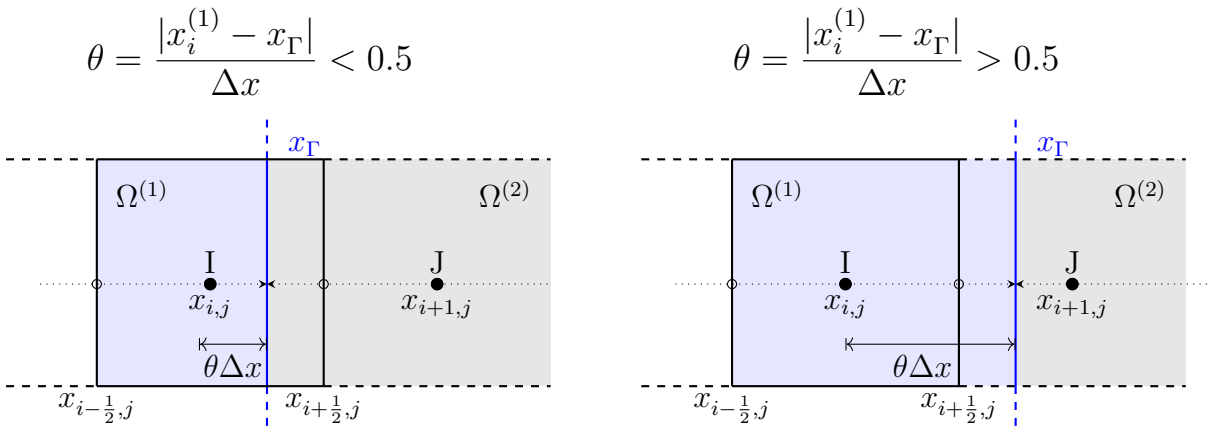



FIGURE 5.10 – Illustration des deux volumes de contrôle selon la position de l'interface

dans cette maille introduit naturellement des variables $C^{(1)}_{\ell,i-\frac{1}{2}}$ et $C^{(2)}_{g,i+\frac{1}{2}}$ appartenant aux sous-domaines distincts $\Omega_1$ et $\Omega_2$ respectivement, comme suit :

$$\begin{aligned}\sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{\partial(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p)} C_p^{n+1}(\mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n})\,\mathrm{d}S &= \left(u_{r,\Gamma} C^{(1)}_{\ell,\Gamma} - u_{r,i-\frac{1}{2}} C^{(1)}_{\ell,i-\frac{1}{2}}\right)\Delta y + \left(u_{r,i+\frac{1}{2}} C^{(2)}_{g,i+\frac{1}{2}} - u_{r,\Gamma} C^{(2)}_{g,\Gamma}\right)\Delta y \\ &= \left(u_{r,i+\frac{1}{2}} C^{(2)}_{g,i+\frac{1}{2}} - u_{r,i-\frac{1}{2}} C^{(1)}_{\ell,i-\frac{1}{2}}\right)\Delta y + u_{r,\Gamma} C^{(1)}_{\ell,\Gamma}(1-\mathrm{He})\Delta y \end{aligned} \tag{5.48}$$

où $u_{r,i-\frac{1}{2}}$ et $u_{r,i+\frac{1}{2}}$ sont les vitesses relatives respectivement aux faces $i-\frac{1}{2}$ et $i+\frac{1}{2}$. Les faces étant immobiles, les vitesses sur celles-ci sont donc égales à la vitesse du fluide. En admettant l'hypothèse que l'interface se déplace à la même vitesse que le fluide, la vitesse relative à l'interface $u_{r,\Gamma}$ est égale à zéro, et par conséquent, la contribution de l'interface (en $x^{(1)}_{\Gamma,j}$ et $x^{(2)}_{\Gamma,j}$), introduisant le saut de Henry, s'annule. Cela revient à écrire :

$$\sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{\partial(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p)} C_p^{n+1}(\mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n})\,\mathrm{d}S = \left(u_{r,i+\frac{1}{2}} C^{(2)}_{g,i+\frac{1}{2}} - u_{r,i-\frac{1}{2}} C^{(1)}_{\ell,i-\frac{1}{2}}\right)\Delta y. \tag{5.49}$$

Ici, le principe de la méthode Ghost-Fluid est introduit pour assurer que la variable $C^{(2)}_{g,i+\frac{1}{2}}$ portée sur la face $i+\frac{1}{2} \in \Omega^{(2)}$ soit exprimée en utilisant des variables appartenant à un seul sous-domaine, en l'occurrence $\Omega^{(2)}$. Cela revient à l'exprimer par une interpolation

entre le nœud $J$ et l'interface $\Gamma$, situés respectivement à des distances de $\frac{\Delta x}{2}$ et $(\frac{1}{2}-\theta)\Delta x$ de celle-ci. Ainsi, nous avons :

$$C^{(2)}_{g,i+\frac{1}{2}} = f(C^{(2)}_{g,\Gamma}, C^{(2)}_{g,i+1}) = \frac{\frac{\mathrm{He}\times C^{(1)}_{\ell,\Gamma}}{2} + (\frac{1}{2}-\theta)C^{(2)}_{g,i+1}}{1-\theta} \quad ; \quad \text{si} \quad \frac{|x^{(1)}_i - x_\Gamma|}{\Delta x} < 0.5 \tag{5.50}$$

avec $C^{(1)}_\Gamma$ qui représente la concentration à l'interface (5.26), obtenue grâce à la continuité des flux (5.23). Le cas symétrique défini par la condition $\frac{|x^{(1)}_i - x_\Gamma|}{\Delta x} > 0.5$, présenté sur l'illustration à gauche de la figure 5.10, revient à écrire de manière analogue :

$$C^{(1)}_{\ell,i+\frac{1}{2}} = f(C^{(1)}_{\ell,\Gamma}, C^{(1)}_{\ell,i}) = \frac{\frac{C^{(1)}_\Gamma}{2} + (\theta-\frac{1}{2})C^{(1)}_{\ell,i}}{\theta} \quad ; \quad \text{si} \quad \frac{|x^{(1)}_i - x_\Gamma|}{\Delta x} > 0.5 \tag{5.51}$$

En substituant l'expression de $C^{(2)}_{g,i+\frac{1}{2}}$ ou $C^{(1)}_{\ell,i+\frac{1}{2}}$, selon la configuration, par (5.50) ou (5.51), dans le bilan du flux d'advection 5.49 de la maille $I$, on obtient :

si $\frac{|x^{(1)}_i - x_\Gamma|}{\Delta x} < 0.5$

$$\begin{aligned}\sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{\partial(\overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_p)} C^{n+1}_p (\mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n})\, \mathrm{d}S &= \left(u_{i+\frac{1}{2}} C^{(2)}_{g,i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}} C^{(1)}_{\ell,i-\frac{1}{2}}\right)\Delta y \\ &= \left(u_{i+\frac{1}{2}} \frac{\beta_1 C^{(2)}_{g,i+1} + \beta_2 C^{(1)}_{\ell,i}}{2} - u_{i-\frac{1}{2}} \frac{C^{(1)}_{\ell,i} + C^{(1)}_{\ell,i-1}}{2}\right)\Delta y\end{aligned} \tag{5.52}$$

avec :

$$\text{Si} \quad \frac{|x^{(1)}_i - x_\Gamma|}{\Delta x} < 0.5 \quad \text{alors} \quad \begin{cases} \beta_1 &= \dfrac{\hat{D}}{D_\ell}\,\mathrm{He} \\ \beta_2 &= \dfrac{\hat{D}}{D_g\, D_\ell}\left[(1-2\theta)\, D_\ell + 2 D_g \mathrm{He}\,\theta\right] \end{cases} \tag{5.53}$$

$$\text{Si} \quad \frac{|x^{(1)}_i - x_\Gamma|}{\Delta x} > 0.5 \quad \text{alors} \quad \begin{cases} \beta_1 &= \dfrac{\hat{D}}{D_g\, D_\ell}\left[(2\theta-1)\mathrm{He} D_g + 2(1-\theta) D_\ell\right] \\ \beta_2 &= \dfrac{\hat{D}}{D_\ell} \end{cases} \tag{5.54}$$

où $\hat{D}$ est le coefficient de diffusivité équivalent, donné par (5.28).

### 5.2.4 Validation de la modélisation du problème d'advection-diffusion

Cette section vise à valider le schéma de transport présenté précédemment, évaluer sa précision et le comparer au modèle à 1-fluide pour la résolution du problème complet d'advection-diffusion de masse. Le cas test considéré consiste en la translation uniforme d'une bulle 2D dans la direction $\mathbf{e}_x$, avec une vitesse imposée $u_x = 1\ \mathrm{m\,s^{-1}}$. La bulle, de dimension $R_0/L = 0.0625$, est initialement placée dans un domaine rectangulaire de dimensions $8d_0 \times 4d_0$, au point $(x_0, y_0) = (4+\varepsilon, 4+\varepsilon)$. Les conditions initiales du champ de concentration, ainsi que les propriétés physiques et le temps final de simulation, sont identiques à ceux du cas précédant de diffusion instationnaire. La figure 5.11 présente le domaine de calcul, le maillage structuré ainsi que le champ initial de fraction volumique.

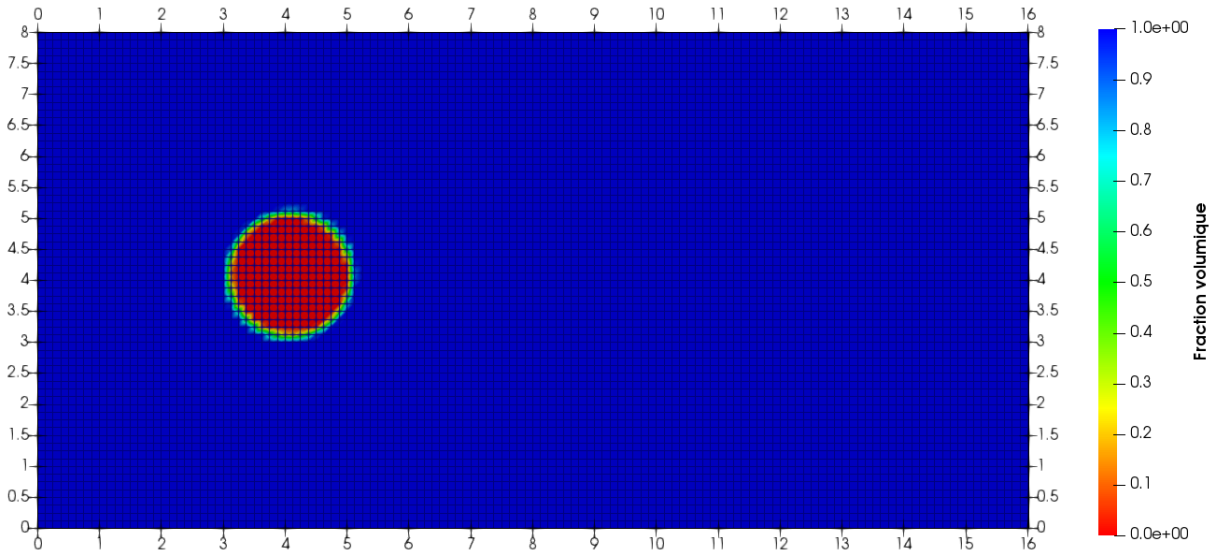



FIGURE 5.11 – Illustration de la géométrie, du champ initial de la fraction volumique et du maillage cartésien du domaine de calcul 2D

#### Analyse du nombre de Sherwood

Pour examiner la qualité du schéma de transport, le nombre de Sherwood est retenu comme paramètre d'évaluation. La figure 5.12 montre l'évolution du nombre de Sherwood au cours du temps pour différents niveaux de résolution spatiale, variant entre $d_0/\Delta x = 8$ et 256. Les deux approches numériques étudiées sont comparées à la référence analytique : la première, le modèle à 2-champs, combine la méthode Ghost-Fluid pour le traitement de la partie diffusion du problème et le schéma GFM élaboré ci-dessus pour le terme convectif de l'équation (figure 5.12a). La seconde, le modèle à 1-fluide (5.12b), ainsi qu'un schéma centré standard pour le transport. Les résultats indiquent que, pour les deux approches,

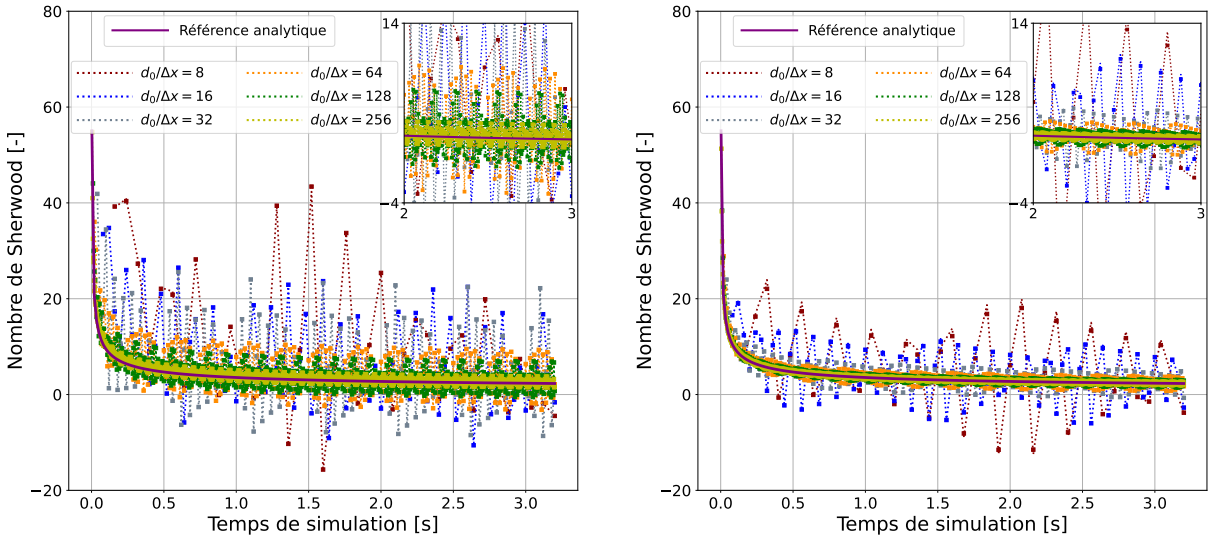



FIGURE 5.12 – Évolution temporelle du nombre de Sherwood pour $d_0/\Delta x = 8$ à 256 d'une bulle en translation uniforme : modèles 2-champs (a) et 1-fluide (b). Les traits discontinus correspondent au calcul avec le dénominateur $C_g/\mathrm{He}$, et les symboles carrés au calcul avec le dénominateur $C_{\Gamma,\ell}$.

le nombre de Sherwood présente de fortes oscillations temporelles. L'amplitude de ces oscillations diminue avec le raffinement du maillage, mais leur fréquence augmente lorsque le nombre de mailles croît. Pour déterminer si ces oscillations non physiques proviennent d'une instabilité du schéma numérique de transport, différents schémas numériques ont été testés pour le terme convectif, comme présenté dans la figure 5.13.
Qu'il s'agisse du schéma Ghost-Fluid ou du schéma centré pour le modèle à 2-champs, ou encore du schéma centré ou UPWIND d'ordre 2 pour le modèle à 1-fluide, les oscillations persistent. Un schéma d'ordre plus élevé (WENO) a également été examiné, mais cela n'a pas permis de résoudre le problème et le constat reste identique : un raffinement du maillage atténue l'amplitude des oscillations, mais augmente leur fréquence, ce qui suggère une corrélation directe entre le nombre de mailles et les oscillations observées.

Cette observation soulève une deuxième question : *ces oscillations sont-elles liées au passage des mailles et, donc, à une désynchronisation entre le transport du champ de concentration et celui de l'interface ?* Pour vérifier cette hypothèse, l'évolution temporelle du nombre de Sherwood a été analysée dans un cas purement diffusif, à travers une bulle statique. Comme l'illustre la figure 5.8, les deux approches de résolution ne présentent aucune oscillation, quelle que soit la résolution spatiale. Un résultat similaire est obtenu pour une bulle déformable en ascension, lorsqu'on se place dans le repère mobile de la bulle afin de la maintenir en position fixe dans le domaine (voir annexe F). Ces observations confirment l'hypothèse selon laquelle les oscillations proviennent d'un transport mal

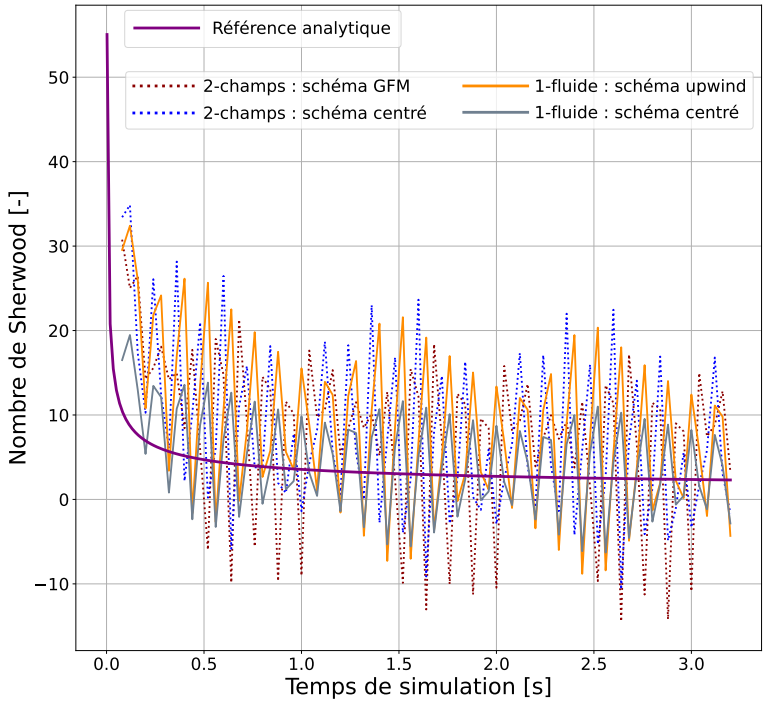



FIGURE 5.13 – Évolution temporelle du nombre de Sherwood pour $d_0/\Delta x = 16$ : comparaison des méthodes un fluide et deux fluides avec différents schémas de transport.

représenté par les schémas standards. Elles conduisent à proposer une nouvelle stratégie destinée à éliminer ces fortes oscillations qui parasitent la solution numérique.

**Conclusion partielle**

À l'issue de l'analyse des résultats de validation présentés dans cette section, deux principales conclusions peuvent être tirées concernant la pertinence de l'approche de résolution phasique du problème d'advection diffusion mise en place :

1. Le traitement du terme de diffusion au moyen d'une version adaptée de la méthode Ghost-Fluid, permettant de maintenir vision phasiques discontinue à l'interface, conduit à une solution numérique de meilleure qualité que celle obtenue avec modèle à 1-fluide.
2. L'ajout du terme d'advection, qu'il soit traité par le schéma décrit dans cette section (GFM), ou par des schémas standards (centré, UPWIND, etc.), engendre pour les deux approches de résolutions, des solutions instables, se traduisant par l'apparition de fortes fluctuations du nombre de Sherwood. Cela souligne la nécessité d'envisager d'autres stratégies de transport pour limiter ces oscillations.

## 5.3 Splitting de l'équation de transfert de masse

Une nouvelle stratégie de résolution de l'équation d'advection-diffusion est adoptée dans cette partie afin de pallier les problèmes d'oscillation rencontrés précédemment. Comme identifié dans la section 5.2.3, ces oscillations sont intrinsèquement liées au passage de l'interface d'une maille à une autre. Cela suggère un transport désynchronisé entre la fraction volumique $\alpha$ et le champ de concentration $C$. L'objectif est donc d'assurer un transport synchronisé entre le transport d'interface et la concentration phasique $C_p$. Un schéma numérique identique est alors utilisé pour les deux champs, $\alpha$ et $C_p$, comme proposé dans [38, 47].
L'équation (3.71) de fraction volumique $\alpha$ est résolue à l'aide d'une méthode VOF géométrique et conservative, avec une reconstruction d'interface linéaire par morceaux (PLIC) et un transport basé sur l'évaluation géométrique des flux traversant chaque face des mailles du domaine [172]. Afin de pouvoir utiliser ce même transport géométrique pour la concentration phasique $C_p$, une méthode de séparation d'opérateurs [144, 26, 60] est appliquée à l'équation de transfert de masse (5.1). Cette démarche consiste à dissocier l'équation de transport de concentration de l'équation de diffusion instationnaire. Formellement, l'opérateur de fractionnement s'écrit : pour tout $p \in \{\ell, g\}$, $\mathbf{x} \in \Omega_p$ et $t \in ]t^{(n)}; t^{(n+1)}]$,

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_p^*}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)C_p^* = 0, \text{ avec } C_p^*(\mathbf{x}, t^{(n)}) = C_p(\mathbf{x}, t^{(n)}) & \text{(5.55a)} \\ \dfrac{\partial C_p^{**}}{\partial t} = \nabla\cdot\left(D_p \nabla C_p^{**}\right), \text{ avec } C_p^{**}(\mathbf{x}, t^{(n)}) = C_p^*(\mathbf{x}, t^{(n+1)}) & \text{(5.55b)} \end{cases}$$

où $C_p(\mathbf{x}, t^{(n)})$ représente la condition initiale de la première équation de transport des espèces. Ensuite, la solution de la deuxième équation, correspondant au problème de diffusion instationnaire, $C_p^{**}(\mathbf{x}, t^{(n+1)})$, est donc la solution associée au problème couplé d'advection-diffusion à l'instant $t^{(n+1)}$, soit :

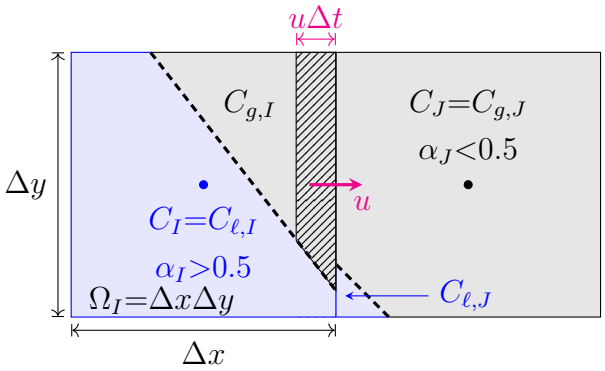
$$C_p(\mathbf{x}, t^{(n+1)}) = C_p^{**}(\mathbf{x}, t^{(n+1)}).$$

Les équations de diffusion (5.55b) pour les phases liquide et gazeuse sont résolues à l'aide de la méthode Ghost-Fluid, comme présenté dans la section 5.2.

La suite de cette section explicite le transport de la concentration de chaque phase avec une méthode compatible avec le transport de la VOF et l'algorithme de Weymouth et Yue [172].

### 5.3.1 Schéma discret à deux champs

Le schéma de transport utilisé pour l'équation d'advection des espèces (5.55a) est identique à celui employé pour l'équation de la fraction volumique $\alpha$. Il repose sur une reconstruction géométrique de l'interface ainsi qu'une évaluation géométrique des bilans de flux aux faces, conformément à la méthode décrite dans [172].




Representation de l'interface pour transport

FIGURE 5.14 – Exemple de cellule où le liquide est la phase majoritaire $C_I = C_\ell$. La phase gazeuse minoritaire dans la cellule $I$ nécessite une reconstruction.

**Formalisme général**

Sous forme synthétique conservative donnée par Weymouth et Yue [172], après intégration temporelle et spatiale sur la cellule $\Omega_I$, (5.55a) s'écrit dans un formalisme général : $\forall I \in \mathcal{I}$ et $\forall p \in \{\ell, g\}$,

$$m(\Omega_I)\frac{\alpha_{p,I}^{(n+1)}C_{p,I}^{*(n+1)} - \alpha_{p,I}^{(n)}C_{p,I}^{*(n)}}{\Delta t} + \sum_{J\in\mathcal{I}^I}\mathcal{F}_{IJ}^{(n)} = \delta_{p_I^M,p}C_{p,I}^{*(n)}\sum_{J\in\mathcal{I}^I} m(\sigma_{IJ})\mathbf{u}_{IJ}\cdot\mathbf{n}_{IJ} \tag{5.56}$$

où $m(\Omega_I)$ et $m(\sigma_{IJ})$ sont les mesures du volume $\Omega_I$ et de la face $\sigma_{IJ}$. $\delta$ étant binaire, définie telle que $\delta_{p_I^M,p} = 1$ si $p = p_I^M$, et $\delta_{p_I^M,p} = 0$ sinon, le terme de droite est non nul que pour le phase majoritaire dans la maille.
Le flux massique $\mathcal{F}_{IJ}^{(n)}$ représente la partie hachurée de la figure 5.14. Dans l'approche proposée, une évaluation géométrique de ce flux est obtenue en utilisant le schéma de VOF conservatif de [172], avec une méthode PLIC. La concentration phasique $C_{p=\ell,g}$ et la fraction volumique liquide $\alpha$ sont mises à jour simultanément pour évaluer $\mathcal{F}_{IJ}^{(n)}$. Dans cette approche, le transport s'effectue séquentiellement dans chacune des trois directions spatiales, suivant l'algorithme suivant :

La fraction volumique $\alpha_I$ et la concentration de phase $C_{p,I}$ doivent être indexées par un entier $k \in [\![1,3]\!]$, $\alpha_I^k$ et $C_{p,I}^k$. Avec la notation $(a_1, a_2, a_3) = (x, y, z)$. Ainsi le schéma discret s'écrit :

**Algorithm:** Schéma VOF avec une représentation géométrique des flux

1 **for** $k \in [\![1,3]\!]$ **do**

$$m(\Omega_I)\,\alpha_I^{k+1} = m(\Omega_I)\,\alpha_I^k - \sum_{J\in\mathcal{N}_I}\left|\mathbf{n}_{I,\sigma_{IJ}}\cdot\mathbf{e}_{a_k}\right|\Big(g_{p,IJ}^k$$

2

$$- \delta_{p_I^M,p}\,\alpha_I^{(n)}\,m(\sigma_{IJ})\,\Delta t^{(n)}\,\mathbf{u}_{IJ}\cdot\mathbf{n}_{I,\sigma_{IJ}}\Big)$$

3 **for** $p \in \{\ell, g\}$ **do**

$$m(\Omega_I)\,\alpha_{p,I}^{k+1}\,C_{p,I}^{k+1} = m(\Omega_I)\,\alpha_{p,I}^k\,C_{p,I}^k - \sum_{J\in\mathcal{N}_I}\left|\mathbf{n}_{I,\sigma_{IJ}}\cdot\mathbf{e}_{a_k}\right|\Big(C_{p,IJ}^k\,g_{p,IJ}^k$$

4

$$- \delta_{p_I^M,p}\,C_{p,I}^{(n)}\,m(\sigma_{IJ})\,\Delta t^{(n)}\,\mathbf{u}_{IJ}\cdot\mathbf{n}_{I,\sigma_{IJ}}\Big)$$

Le rôle du terme $|\mathbf{n}_{I,\sigma_{IJ}} \cdot \mathbf{e}_{\alpha_k}|$ est de ne retenir que la contribution dans la direction spatiale souhaitée. Le terme $g_{p,IJ}$ représente la mesure algébrique du volume géométrique de la phase $p$ traversant la face $\sigma_{IJ}$ durant l'intervalle de temps $\Delta t$ avec le schéma VOF. Il est comptabilisé positivement lorsque l'écoulement quitte le volume de contrôle $\Omega_I$, et négativement dans le cas contraire.

Nous rappelons ici que le schéma discret à deux champs repose sur l'écriture d'équations distinctes pour chaque phase, tout en utilisant une unique variable nodale par cellule $I \in \mathcal{I}$. La fraction volumique de liquide est définie par $\alpha_I^{(n)} = \alpha_{\ell,I}^{(n)}$, ou, de manière équivalente, $\alpha_I^{(n)} = 1 - \alpha_{g,I}^{(n)}$. Dans les cellules remplies entièrement de liquide ($\alpha_I^{(n)} = 1$), on a $C_I^{(n)} = C_{\ell,I}^{(n)}$, tandis que dans les cellules purement gazeuses ($\alpha_I^{(n)} = 0$), $C_I^{(n)} = C_{g,I}^{(n)}$. En revanche, pour une cellule diphasique, telle que $0 < \alpha_I^{(n)} < 1$, la concentration $C_I^{(n)}$ correspond uniquement à celle de la phase majoritaire présente dans le volume $\Omega_I$.

$$C_I = \begin{cases} C_{\ell,I} & \text{si } \alpha_I \geq 0,5 \\ C_{g,I} & \text{sinon} \end{cases} \tag{5.57}$$

L'équation de transport (5.56) est résolue pour chaque phase p dans toutes les cellules $\Omega_I$ du maillage. La première résolution traite la phase liquide, que cette dernière soit majoritaire ou non dans la cellule. La phase gazeuse est ensuite traitée de la même façon [1]. Pour chaque résolution de la phase $p$, il est alors nécessaire de connaître la concentration dans la phase minoritaire pour les cellules diphasiques. Par exemple, quand la phase liquide est traitée et que la fraction volumique dans la maille $\alpha = 0.2$, la concentration dans le liquide n'est pas connue et doit être reconstruite.

Dans la suite de cette section, trois méthodes d'approximation de la solution dans la phase minoritaire sont proposées.

#### 5.3.1.1 Approximation par la condition de saut

Parmi les différentes approximations permettant de représenter la phase minoritaire $C_{p_I^m,I}^{*(n)}$, non résolue dans les mailles mixtes, la méthode la plus intuitive consiste à utiliser la condition de saut de Henry (5.5). En supposant que les relations d'interface sont valables sur l'ensemble de la cellule diphasique. On obtient alors :

$$C_{p_I^m,I}^{*(n)} = C_{p_I^M,I}^{*(n)} \left( \mathrm{He}\, \delta_{p_I^M,\ell} + \frac{1}{\mathrm{He}}\, \delta_{p_I^M,g} \right) \tag{5.58}$$

avec $\delta$ une fonction telle que $\delta_{p_I^M,p} = 1$ si $p = p_I^M$, sinon $\delta_{p_I^M,p} = 0$. En considérant le cas particulier illustré à la figure 5.14, où la maille coupée située à droite est majoritairement remplie de liquide $C_{p_I^M,I}^{*(n)} = C_\ell$, caractérisée par une fraction volumique $\alpha > 0{,}5$, et la phase minoritaire correspond alors à la phase gazeuse $C_{p_I^m,I}^{*(n)} = C_g$ :

$$C_{p_I^m,I}^{*(n)} = \mathrm{He}\; C_{p_I^M,I}^{*(n)} \tag{5.59}$$

1. l'ordre n'est pas important

De manière similaire, dans la maille coupée située à gauche de la même illustration, majoritairement occupée cette fois par la phase gazeuse ($C^{(n)}_{p^M_I,I} = C_g$), la concentration de la phase minoritaire ($C^{(n)}_{p^m_I,I} = C_\ell$) est obtenue à l'aide de la relation suivante :

$$C^{*(n)}_{p^m_I,I} = \frac{1}{\mathrm{He}} C^{*(n)}_{p^M_I,I} \tag{5.60}$$

#### 5.3.1.2 Approximation par une combinaison des cellules voisines $C_J$

Une autre approche pour représenter les variables associées à la phase minoritaire non résolue dans les mailles diphasiques consiste à supposer que cette phase possède la même concentration que celle des cellules voisines $\Omega_J$, majoritairement remplies de la même phase minoritaire que $\Omega_I$ ($C^{*(n)}_{p^m_I,I} = C^{*(n)}_{p^M_J,J}$). Étant donné que plusieurs cellules voisines $\Omega_J$ peuvent satisfaire cette condition, la concentration $C^{*(n)}_{p^m_I,I}$ est alors approximée par une combinaison des concentrations dans ces cellules voisines, majoritairement occupées par la phase minoritaire de la maille $\Omega_I$. La concentration de la phase majoritaire des mailles voisines, $C^{*(n)}_{p^M_J,J}$ étant égale à la variable résolue de la maille $C^{*(n)}_J$, la combinaison s'écrit :

$$C^{*(n)}_{p^m_I,I} = \frac{\sum\limits_{J \in \mathcal{N}^m_I} \lambda_J C^{*(n)}_J}{\sum\limits_{J \in \mathcal{N}^m_I} \lambda_J} \tag{5.61}$$

Un exemple de pondération est donné par :

$$\lambda_J = \left( \frac{|\alpha_J - \alpha_I|}{x_{IJ}} \right)^\zeta, \tag{5.62}$$

où $\zeta \in \mathbb{N}$. Avec ce choix, le poids attribué à la cellule $J$ augmente d'autant plus que la normale à l'interface pointe vers $\Omega_J$ et que la valeur de $\zeta$ est élevée. En pratique, on utilise $\zeta = 1$.

En se basant sur l'exemple illustré sur la figure ci-dessus, 5.15, la concentration de la phase minoritaire $C_{p^m_I,I}$ peut être construite, telle que :

$$C^{*(n)}_{p^m_I,I} = \frac{\lambda_{i+1,j} C^{*(n)}_{i+1,j} + \lambda_{i,j+1} C^{*(n)}_{i,j+1}}{\lambda_{i+1,j} + \lambda_{i,j+1}} \tag{5.63}$$

**Remarque.** Le voisinage peut également être étendu aux cellules situées dans les directions diagonales, ce qui revient à considérer l'information provenant de la maille $(i{+}1, j{+}1)$ dans la figure 5.15.

#### 5.3.1.3 Approximation par une concentration interfaciale $C_{p^M_J,\Gamma_{IJ}}$

Une troisième approche consiste à définir la concentration de la phase non résolue dans la maille diphasique, notée $C^{*(n)}_{p^m_I,I}$, à partir de la concentration interfaciale correspondante

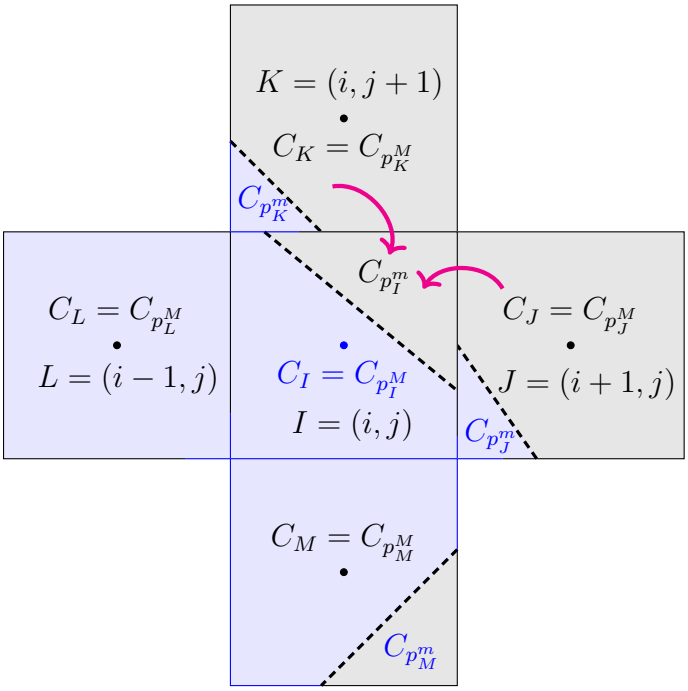



FIGURE 5.15 – Schéma illustratif des mailles $J$ et $K$ voisines de la cellule $I$ dont les concentrations sont utilisées pour remplir la phase minoritaire de la maille $I$

$C_{p_I^m,\Gamma_{IJ}}$. Cette dernière représente la concentration de la phase minoritaire dans la maille $I$, notée $p_I^m$, et évaluée à l'interface $\Gamma_{IJ}$. Elle est obtenue par une approximation locale entre les nœuds des cellules $I$ et $J$, avec $J \in \mathcal{N}_I^m$, conformément à l'expression (5.11b). Puisque $J \in \mathcal{N}_I^m$ n'est pas nécessairement unique, une combinaison de $C_{p_J^M,\Gamma_{IJ}}$ peut-être utilisée :

$$C_{p_I^m,I}^{*(n)} = \frac{\sum_{J \in \mathcal{N}_I^m} \lambda_J C_{p_J^M,\Gamma_{IJ}}}{\sum_{J \in \mathcal{N}_I^m} \lambda_J} \tag{5.64}$$

En se basant sur l'exemple illustré sur la figure ci-dessous, 5.16, la concentration de la phase minoritaire $C_{p_I^m,I}$ peut être construite, telle que :

$$C_{p_I^m,I}^{*(n)} = \frac{\lambda_{i+1,j} C_{g,\Gamma,i+1,j} + \lambda_{i,j+1} C_{g,\Gamma,i,j+1}}{\lambda_{i+1,j} + \lambda_{i,j+1}} \tag{5.65}$$

Ces trois approches permettent de définir les quantités manquantes pour le transport du champ de concentration dans les phases minoritaires des mailles diphasiques. Ce schéma transporte la concentration comme il transporte la VOF. Dans le cas ou la concentration est initialisée de manière binaire, une reconstruction par les voisins permet de maintenir cette initialisation.

**Remarque.** Il convient de noter qu'une approche géométrique pour évaluer les flux massiques est également utilisée pour le modèle à 1-fluide. Pour cela, on reconstruit les va-

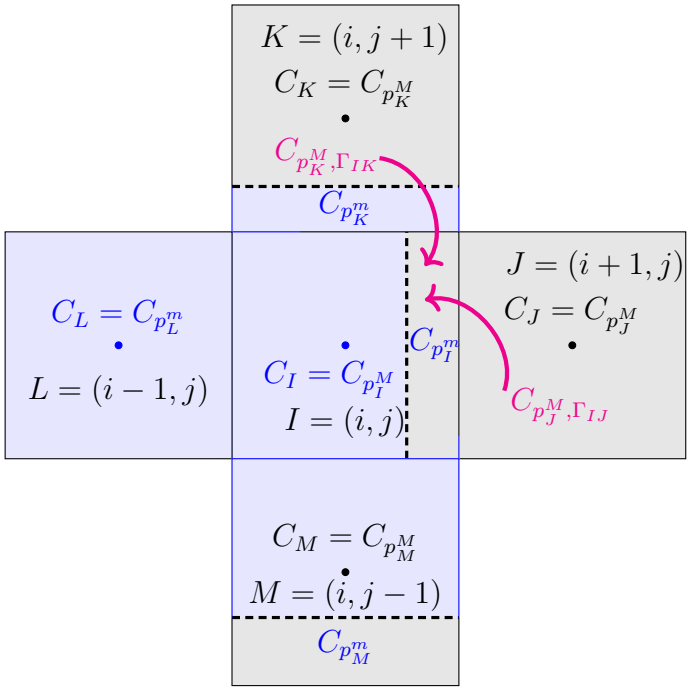



FIGURE 5.16 – Schéma illustratif du remplissage de la phase minoritaire de la maille $I$ à partir des concentrations interfaciales issues des contributions des mailles voisines $J$ et $K$

riables phasiques $C_\ell$ et $C_g$ dans les mailles diphasiques en combinant la définition de la variable de mélange $C = \alpha C_\ell + (1-\alpha) C_g$ et la relation de saut $C_g = \mathrm{He}\, C_\ell$, comme expliqué dans la section précédente 5.2.2, page 123. Ces variables reconstruites données par (5.38), sont ensuite transportées par le schéma de la VOF conservative de WEYMOUTH et YUE [172], avec une méthode PLIC.

### 5.3.2 Schéma discret à deux champs pour l'équation de diffusion de masse

Une fois l'équation de transport résolue, la condition initiale de l'équation de diffusion $C^{*(n+1)}$ est connue, permettant de générer la solution de l'équation de diffusion $C_I^{**(n+1)}$, qui est ensuite égale à la solution finale du problème couplé advection-diffusion $C^{**(n+1)} = C^{(n+1)}$.

Dans le but de définir un schéma temporel adéquat et compatible avec le schéma de transport, dans lequel la présence des deux phases, liquide et gazeuse, est prise en compte, l'équation du problème de pure diffusion est intégrée sur un volume de contrôle $\Omega'_I$ qui peut différer de $\Omega_I$, en fonction du traitement du terme temporel, lequel sera détaillé dans la section suivante. Pour toute maille $I$, on a :

$$\int_{\overline{\Omega}'_I \cap \overline{\Omega}_p} \frac{\partial C_p^{**}}{\partial t} \, \mathrm{d}V = \int_{\sigma' = \partial(\overline{\Omega}'_I \cap \overline{\Omega}_p)} D_p \frac{\partial C_p^{**}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma'}} \, \mathrm{d}S \tag{5.66}$$

avec $\mathbf{n}_{I,\sigma'}$ le vecteur unitaire normal sortant à $\overline{\Omega}'_I \cap \overline{\Omega}_p$.

On rappelle l'écriture de l'équation discrète. Pour toute maille $I$ :

$$\left( \sum_{p \in \{\ell, g\}} \int_{\overline{\Omega}'_I \cap \overline{\Omega}_p} \frac{\partial C_p^{**}}{\partial t} \, \mathrm{d}V \right)_{\text{approx}}^{(n+1)} = \left( \sum_{p \in \{\ell, g\}} \int_{\sigma' = \partial(\overline{\Omega}'_I \cap \overline{\Omega}_p)} D_p \frac{\partial C_p^{**(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma'}} \, \mathrm{d}S \right)_{\text{approx}} \tag{5.67}$$

Dans le terme de droite de l'équation (5.67), la somme des flux massiques entre les deux phases s'annule en raison de la continuité du flux massique à travers l'interface. Seules subsistent les contributions aux limites sur $\partial\Omega'_I$.

Concernant l'approximation du flux de masse, le terme figurant dans le membre de droite de l'équation est traité selon l'approche Ghost-Fluid, telle que détaillée en section 5.2.1, dans la partie consacrée au traitement du problème de diffusion instationnaire.

#### Approximation de la dérivée temporelle

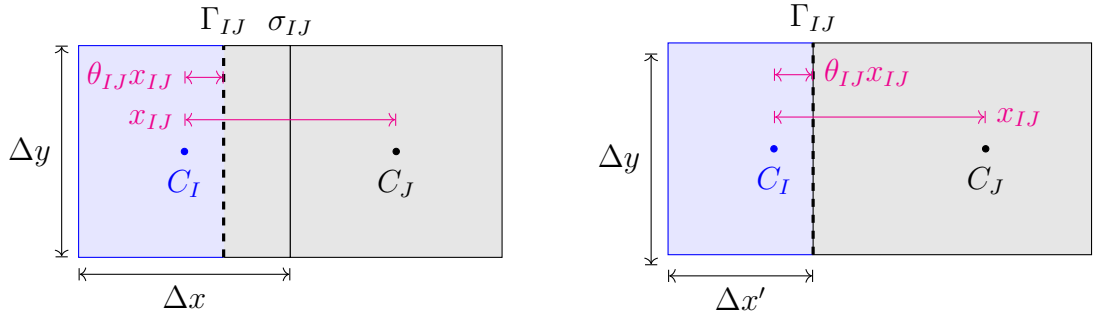
Une fois le champ de concentration et la fraction volumique transportés, la fraction volumique $\alpha$ est connue à l'instant $n+1$ pour tous les développements suivants. Dans cette partie, nous présentons les différents schémas temporels élaborés pour intégrer temporellement l'équation de diffusion des espèces. Pour cela, la contribution de la dérivée temporelle dans l'équation (5.67) est exprimée comme suit :

$$\left( \sum_{p \in \{\ell, g\}} \int_{\overline{\Omega}'_I \cap \overline{\Omega}_p} \frac{\partial C_p^{**}}{\partial t} \, \mathrm{d}V \right)_{\text{approx}}^{(n+1)} = m(\Omega'_I) \sum_{p \in \{\ell, g\}} \frac{\lambda_{p,I} C_{p,I}^{**(n+1)} - \gamma_{p,I} C_{p,I}^{**(n)}}{\Delta t} \tag{5.68}$$

avec $\lambda_{p,I}$ et $\gamma_{p,I}$, deux paramètres qui conduiront à des approximations différentes du schéma temporel. Deux approches principales sont étudiées :

— La première considère un volume de contrôle fixe, correspondant au volume de la maille. On note : $m(\Omega'_I) = m(\Omega_I) = \Delta x \Delta y$. Cette approche correspond à celle utilisée dans la section précédente.

— La seconde considère que le volume de contrôle des mailles diphasiques, ainsi que celui de leur voisinage immédiat, est variable, de telle sorte que chaque volume de contrôle est monophasique dans une représentation unidirectionnelle (1D). On note : $m(\Omega'_I) = \Delta x' \Delta y$, tel que illustré sur la figure 5.17.




*Représentation du volume fixe :* $m(\Omega'_I) = m(\Omega_I) = \Delta x \Delta y$

*Représentation du volume variable :* $m(\Omega'_I) \neq m(\Omega_I) = \Delta x' \Delta y$

FIGURE 5.17 – Illustration des volumes de contrôle utilisés pour l'intégration temporelle de l'équation de diffusion

**Volumes de contrôle fixes $m(\Omega'_I) = m(\Omega_I)$** Dans le cas où l'on considère que le volume de contrôle est égal au volume de la maille $m(\Omega'_I) = m(\Omega_I)$, deux variantes de schémas et leurs déclinaisons sont proposées :

I. **Schéma temporel classique :**
L'approche la plus simple consiste à considérer la maille $\Omega_I$ comme remplie d'une seule phase, la phase majoritaire. On a alors, $\lambda_{p,I} = \gamma_{p,I} = 1$ et $C^{**}_{p_I^M,I} = C^{**}_I$. Avec ce choix, la dérivée temporelle s'écrit,

$$\left( \sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{\overline{\Omega}'_I \cap \overline{\Omega}_p} \frac{\partial C^{**}_p}{\partial t} \, \mathrm{d}V \right)^{(n+1)}_{\text{approx}} = \frac{C_I^{**(n+1)} - C_I^{**(n)}}{\Delta t} m(\Omega_I)$$

Cette approximation est vraie lorsque les mailles sont monopasiques, $\alpha_I^{(n+1)} = \alpha_I^{(n)} = 0$ ou 1, et on reconnaît un schéma classique d'Euler appliqué à $C_I^{**}$. Cependant, ce schéma constitue une simplification dans le cas contraire, où la maille composée des deux phases.

II. **Schéma temporel tenant en compte la présence des deux phases**

Pour tenir compte de la présence de plusieurs phases dans $\Omega_I$, la fraction volumique doit être incorporée dans le schéma temporel, de manière à pondérer chaque phase par son taux de présence dans la maille diphasique : $\lambda_{p,I} = \gamma_{p,I} = \alpha_{p,I}^{(n+1)}$ et $C^{**}_{p_I^M,I} = C_I^{**}$.

$$\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{\overline{\Omega}'_I \cap \overline{\Omega}_p} \frac{\partial C_p^{**}}{\partial t}\,\mathrm{d}V\right)^{(n+1)}_{\text{approx}} = \frac{\alpha_{p_I^M,I} C^{**(n+1)}_{p_I^M,I} - \alpha_{p_I^M,I} C^{**(n)}_{p_I^M,I}}{\Delta t} m(\Omega_I) + \frac{\alpha_{p_I^m,I} C^{**(n+1)}_{p_I^m,I} - \alpha_{p_I^m,I} C^{**(n)}_{p_I^m,I}}{\Delta t} m(\Omega_I) \quad (5.69)$$

Cela implique qu'il est nécessaire de prendre en compte la phase minoritaire $p_I^m$ présente dans la maille, dès lors que $\alpha_{p_I^m,I} \neq 0$. Or, la concentration associée à cette phase, $C^{**}_{p_I^m,I}$, n'étant pas directement résolue, elle doit être définie de la même manière que celle utilisée pour la partie transport. L'expression (5.69) est alors déclinée en trois approximations.

II-1 **Approximation par la condition de saut**

En supposant que la relation de de saut de Henry (5.5) soit étendue à l'ensemble du volume $\Omega_I$, alors $C^{**}_{p_I^m,I}$ est défini par la relation (5.58). Ceci revient à écrire le schéma temporel tel que :

$$\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{\overline{\Omega}'_I \cap \overline{\Omega}_p} \frac{\partial C_p^{**}}{\partial t}\,\mathrm{d}V\right)^{(n+1)}_{\text{approx}} = \frac{\alpha_{p_I^M,I} C^{**(n+1)}_{p_I^M,I} - \alpha_{p_I^M,I} C^{**(n)}_{p_I^M,I}}{\Delta t} m(\Omega_I) + \left(\mathrm{He}\,\delta_{p_I^M,\ell} + \frac{1}{\mathrm{He}}\,\delta_{p_I^M,g}\right) \frac{\alpha_{p_I^m,I} C^{**(n+1)}_{p_I^m,I} - \alpha_{p_I^m,I} C^{**(n)}_{p_I^m,I}}{\Delta t} m(\Omega_I) \quad (5.70)$$

En se mettant dans le situation spécifique, illustrée dans la figure 5.15, où la phase minoritaire étant la phase gazeuse $C^{**(n)}_{p_I^m,I} = \mathrm{He}\, C^{**(n)}_{p_I^M,I}$, cette variante du schéma temporel, s'écrit finalement :

$$\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}} \int_{\overline{\Omega}'_I \cap \overline{\Omega}_p} \frac{\partial C_p^{**}}{\partial t}\,\mathrm{d}V\right)^{(n+1)}_{\text{approx}} = \left(\frac{\alpha_{i,j} C^{**(n+1)}_{i,j} - \alpha_{i,j} C^{**(n)}_{i,j}}{\Delta t} + \mathrm{He}\frac{(1-\alpha_{i,j}) C^{**(n+1)}_{i,j} - (1-\alpha_{i,j}) C^{**(n)}_{i,j}}{\Delta t}\right) m(\Omega_I) \quad (5.71)$$

II-2 **Approximation par une combinaison des cellules voisines** $C_{p_J^M}$

La concentration de la phase minoritaire $C^{**}_{p_I^m,I}$ peut également être évaluée à l'aide des informations de voisinage remplies majoritairement par la phase

minoritaire de la maille $\Omega_I$ ($C^{*(n)}_{p^m_I,I} = C^{*(n)}_{p^M_J,J}$), via la relation (5.61) présentée pour la partie transport. Ceci revient à écrire :

$$\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}}\int_{\overline{\Omega}'_I\cap\overline{\Omega}_p}\frac{\partial C^{**}_p}{\partial t}\,\mathrm{d}V\right)^{(n+1)}_{\text{approx}} = \left(\frac{\alpha_{p^M_I,I}C^{**(n+1)}_{p^M_I,I} - \alpha_{p^M_I,I}C^{**(n)}_{p^M_I,I}}{\Delta t} + \frac{\alpha_{p^m_I,I}C^{**(n+1)}_{p^M_J} - \alpha_{p^m_I,I}C^{**(n)}_{p^M_J}}{\Delta t}\right) m(\Omega_I) \quad (5.72)$$

avec $\alpha_{p^m_I,I} = 1-\alpha_{p^M_I,I}$. En considérant le cas spécifique illustré sur la figure 5.15, où la maille diphasique $\Omega_I$ est majoritairement occupée par la phase liquide tandis que la phase gazeuse y est minoritaire, la concentration de cette dernière ( $C^{**}_{p^m_I,I}$), est définie par l'expression (5.63).

II-3 **Approximation par une concentration interfaciale** $C_{p^M_J,\Gamma_{IJ}}$
Dans le cas où la phase minoritaire $C^{**}_{p^m_I,I}$ et évaluée grâce la concentration d'interface $C_{p^M_J,\Gamma_{IJ}}$ donnée l'expression (5.11b), le schéma temporel est donc approché par :

$$\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}}\int_{\overline{\Omega}'_I\cap\overline{\Omega}_p}\frac{\partial C^{**}_p}{\partial t}\,\mathrm{d}V\right)^{(n+1)}_{\text{approx}} = \left(\frac{\alpha_{p^M_I,I}C^{**(n+1)}_{p^M_I,I} - \alpha_{p^M_I,I}C^{**(n)}_{p^M_I,I}}{\Delta t} + \frac{\alpha_{p^m_I,I}C^{**(n+1)}_{p^M_J,\Gamma_{IJ}} - \alpha_{p^m_I,I}C^{**(n)}_{p^M_J,\Gamma_{IJ}}}{\Delta t}\right) m(\Omega_I) \quad (5.73)$$

Une fois le voisinage permettant le calcul de $C_{p^M_J,\Gamma_{IJ}}$ identifié, une combinaison fondée sur la relation (5.64) est appliquée. En considérant le cas spécifique illustré en figure 5.16, où la maille diphasique $\Omega_I$ est majoritairement occupée par la phase liquide et où la phase minoritaire est la phase gazeuse, la concentration dans cette dernière est alors reconstruite à l'aide de la relation (5.65) ($C^{**}_{p^m_I,I} = C^{**}_{p^M_J,\Gamma_{IJ}}$).

Il est à noter que la dérivée discrète est une relation algébrique qui est constituée des concentrations sur la cellule $I$, mais aussi sur certains voisins $J \in \mathcal{N}^m_I$, à la fois à l'instant $t^{(n)}$, mais également à l'instant $t^{(n+1)}$ : la contribution temporelle contribue donc à la diagonale de la matrice ainsi qu'aux termes extra-diagonaux.

**Volumes de contrôle variables** $m(\Omega'_I) \neq m(\Omega_I)$ Dans le but d'éviter les approximations des phases minoritaires non-résolues, au lieu de considérer, comme précédemment, le volume de contrôle comme potentiellement rempli de deux phases, la taille du volume de contrôle $\Omega'_I$ est ici ajustée pour ne contenir qu'une seule phase (voir la figure 5.17).

Par conséquent, sauf lorsque $\mathcal{N}_I^m = \varnothing$ (cas de mailles monophasiques), ce qui implique $\Omega'_I = \Omega_I$, le volume de contrôle $\Omega'_I$ diffère du volume $\Omega_I$. S'il existe $J \in \mathcal{N}_I^m$, alors la face de la cellule $\sigma_{IJ} = \overline{\Omega}_I \cap \overline{\Omega}_J$ est remplacée par $\Gamma_{IJ}$ (la position de l'interface approximée par la relation (5.9)). Par conséquent, la taille de $\Omega'_I$ s'écrit : $\forall I \in \mathcal{I}$, tel qu'un nœud de cellule $J \in \mathcal{N}_I^m$ existe,

$$m(\Omega'_I) = m(\Omega_I)\left(1 + \sum_{J \in \mathcal{N}_I^m}\left(\frac{m(\sigma_{IJ})}{m(\Omega_I)}\theta_{IJ}x_{IJ} - 0.5\right)\right) \tag{5.74}$$

Le schéma temporel résultant est ainsi donné par l'expression suivante :

$$\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}}\int_{\overline{\Omega}'_I\cap\overline{\Omega}_p}\frac{\partial C_p^{**}}{\partial t}\,\mathrm{d}V\right)_{\text{approx}}^{(n+1)} = \frac{C_I^{**(n+1)} - C_I^{**(n)}}{\Delta t}m(\Omega'_I)$$

Étant donné que, dans ce cas, toutes les mailles sont désormais monophasiques, les coefficients de pondération deviennent $\lambda_{p,I} = \gamma_{p,I} = 1$.

En considérant le cas illustré en figure 5.17, où le volume de contrôle de la maille initialement diphasique $\Omega_I$ ($I = (i,j)$) a été ajusté selon $\Omega'_I = \Delta x' \Delta y$, de manière à ce que cette cellule devienne monophasique (occupée uniquement par une seule phase), à savoir $C_I = C^{**}_{p_I^M,I}$, ici la phase liquide. En effet, le volume a été réduit, tel que $m(\Omega'_I) < m(\Omega_I)$, en raison de $\Delta x' < \Delta x$. Par conséquent, la maille voisine $\Omega_J$ ($J = (i+1,j)$) devient elle aussi monophasique. Son volume de contrôle est augmenté, $m(\Omega'_J) > m(\Omega_J)$, de manière à contenir uniquement la phase gazeuse, y compris la portion de gaz initialement minoritaire dans la maille $I$.
Le schéma temporel pour ce cas spécifique s'écrit donc :

$$\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}}\int_{\overline{\Omega}'_I\cap\overline{\Omega}_p}\frac{\partial C_p^{**}}{\partial t}\,\mathrm{d}V\right)_{\text{approx}}^{(n+1)} = \frac{C_{i,j}^{**(n+1)} - C_{i,j}^{**(n)}}{\Delta t}\Delta x'\Delta y$$

Il est à noter que cet ajustement est fait de manière directionnelle, la même logique est appliquée dans les directions $y$ et $z$.

### 5.3.3 Résultats des différents schémas temporels pour la diffusion instationnaire

Afin d'examiner la pertinence des différentes variantes de schémas temporels proposées pour le modèle à deux champs, la précision de ce dernier, couplé à chacune d'elles, est évaluée par rapport à une solution analytique et comparée à celle du modèle à 1-fluide. Les cas tests réalisés intègrent les trois régimes de transfert de masse décrits en section 2.2.3.

La configuration étudiée est similaire à celle de la section 5.2.2 et consiste en un disque rempli de fluides distincts, selon le régime de transfert de masse considéré, au sein d'un domaine carré rempli d'un fluide au repos. Comme dans l'analyse effectuée dans la section précédente, la comparaison s'appuie à la fois sur l'évaluation du champ de concentration et du nombre de Sherwood.

#### 5.3.3.1 Transfert extérieur $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$

Le transfert extérieur, caractérisé par la condition $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$, est considéré dans ce premier test de validation. Les coefficients $D_A$ et $D_B$ correspondent respectivement aux coefficients de diffusion de la phase interne, ici gazeuse, et de la phase externe, ici liquide.

**Étude de convergence sur le champ de concentration**

La précision du modèle à deux champs, pour les différentes variantes de schémas temporels, ainsi que celle du modèle à 1-fluide reconstruit, est évaluée au moyen du calcul de l'erreur relative en norme $L_2$ sur le champ de concentration, notée $\|C\|_{2,r}$ (5.39). Les tests de convergence sont réalisés pour différents niveaux de résolution spatiale, définis par $\Delta x = d_0/N$, avec $N$ variant de 8 à 512, tel qu'illustré sur la figure 5.18. Celle-ci présente

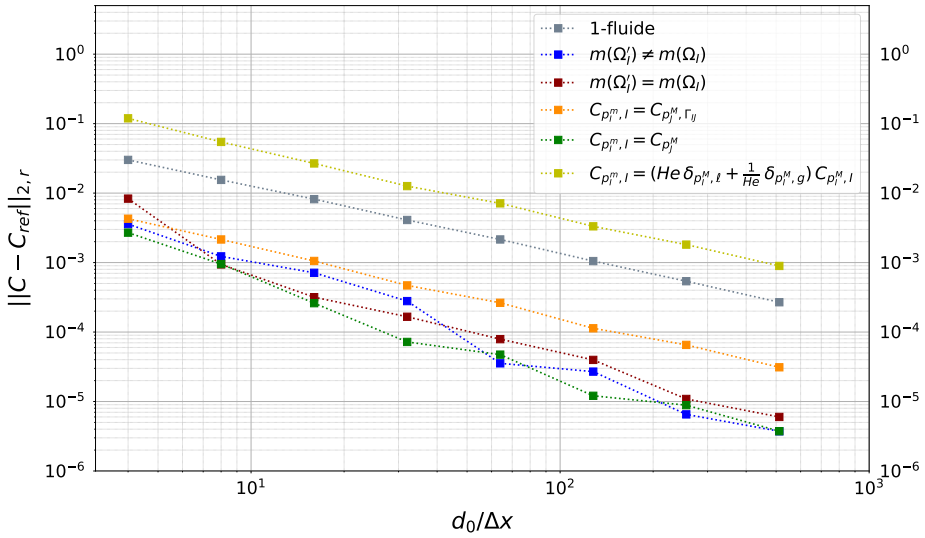



FIGURE 5.18 – Résultats de convergence du champ de concentration pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert extérieur à travers une bulle statique.

l'évolution de l'erreur relative en norme $\|C\|_{2,r}$, sur le champ de concentration, en fonction du nombre de mailles par diamètre de disque. Les résultats concernent le modèle à 1-fluide, avec la reconstruction du champ de concentration phasique, ainsi que les cinq variantes de schémas temporels appliquées au modèle à deux champs. L'étude est réalisée pour trois niveaux de raffinement temporel, correspondant à $\Delta x/\Delta t = 2.5, 5$ et 10 (voir Annexe A1). Une convergence temporelle d'ordre 1 est observée pour trois variantes du modèle à deux

champs ($m(\Omega'_I) = m(\Omega_I)$, $m(\Omega'_I) \neq m(\Omega_I)$ et $C_{p_I^m,I} = C_{p_J^M}$) : le niveau d'erreur décroît de $4 \times 10^{-6}$ pour le pas de temps le plus grossier ($\Delta x/\Delta t = 2.5$) à environ $1 \times 10^{-6}$ pour le pas de temps le plus fin, et ce, pour la résolution spatiale la plus fine ($d_0/\Delta x = 512$). En revanche, aucune dépendance en fonction du pas de temps n'est constatée pour le modèle à 1-fluide ni pour le reste des variantes du modèle à deux champs. Cela signifie que ces approches ont atteint leur régime asymptotique de convergence temporelle et que le niveau d'erreur ne peut plus être réduit par un simple raffinement temporel, contrairement au premier groupe de solutions.

Par ailleurs, pour ces trois niveaux de pas de temps, toutes les méthodes étudiées se révèlent globalement convergentes spatialement avec un ordre proche de 1. En termes de précision, le modèle à deux champs, couplé au schéma basé sur la relation de saut, est le moins performant, générant une erreur supérieure à celle du modèle à 1-fluide. À l'inverse, toutes les autres variantes du modèle à deux champs sont plus précises que le modèle à 1-fluide, avec une erreur réduite d'au moins un facteur dix, comme observé pour le schéma construit à partir de la variable d'interface. Les schémas temporels classiques ($m(\Omega'_I) = m(\Omega_I)$), le schéma basé sur des volumes de contrôle variables ($m(\Omega'_I) \neq m(\Omega_I)$), ou encore celui fondé sur une combinaison de solutions dans les mailles voisines ($C_{p_I^m,I} = C_{p_J^M}$) produisent des erreurs de même ordre, réduites d'environ deux décades par rapport à l'erreur du modèle à 1-fluide pour les maillages les plus fins. Pour des résolutions plus grossières, par exemple $d_0/\Delta x = 4$ et 8, on constate que, hormis le schéma construit à partir de la relation de saut, l'ensemble des schémas temporels couplés au modèle à deux champs se révèle compétitif et environ dix fois plus précis que le modèle à 1-fluide.

**Étude de convergence sur le nombre de Sherwood**

Dans cette partie du travail, deux approches numériques sont proposées pour le calcul du nombre de Sherwood.

- La première s'appuie sur l'écriture continue de l'équation de transfert de masse en volumes finis (5.4), comme décrit dans la section précédente 5.2.2.2, page 123. Le calcul du nombre de Sherwood, noté $Sh_1$, repose ainsi sur une approximation continue du flux diffusif.
- La seconde approche consiste à approximer ce même flux par une formulation discrète, conçue pour rester compatible avec le schéma temporel utilisé (5.67). Le nombre de Sherwood s'écrit $Sh_2$ et son expression est détaillée par la suite.

Ainsi, pour exprimer le nombre de Sherwood, noté $Sh_2$, cette méthode s'appuie directement sur l'écriture discrète de l'équation de diffusion dans les deux phases, ce qui permet

d'écrire :

$$\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}}\int_{\partial(\overline{\Omega}'_I\cap\overline{\Omega}_p)} D_p\frac{\partial C_p^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma}}\,dS\right)_{\text{approx}} = \sum_{J\in\mathcal{N}_I^M} m(\sigma_{IJ})D_{p_I^M}\frac{C_J^{(n+1)}-C_I^{(n+1)}}{x_{IJ}} + \sum_{J\in\mathcal{N}_I^m}\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}}\int_{\sigma'=\overline{\Omega}'_I\cap\overline{\Omega}'_J\cap\overline{\Omega}_p} D_p\frac{\partial C_p^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma'}}\,dS\right)_{\text{approx}} \tag{5.75}$$

Le premier terme de l'équation de droite correspond au flux massique monophasique classique. En effectuant la somme sur toutes les mailles $I \in \mathcal{I} \mid p_I^M \in P'$, où $P'$ désigne la phase intérieure du disque (qui correspond, dans ce cas de transfert extérieur, à la phase gazeuse), ce terme s'annule en vertu de la conservation du flux sur les faces séparant des mailles majoritairement occupées par une même phase ($p_I^M = p_J^M$). Dans ce cas, les seuls flux restants sont donc ceux exprimés sur les faces séparant deux nœuds adjacents appartenant à des phases différentes ($p_I^M \neq p_J^M$), comme l'exprime le second terme de l'équation de droite. Pour formuler cette intégrale, le flux massique évalué à la face commune entre $\bar{\Omega}'_I$ et $\bar{\Omega}'_J$ de la phase $p \mid p_I^M \in P'$ est remplacé par l'écriture discrète de la dérivée temporelle dans $\Omega'_I$.

$$\sum_{I\in\mathcal{I}\ \mid\ p_I^M\in P'}\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}}\int_{\partial(\overline{\Omega}'_I\cap\overline{\Omega}_p)} D_p\frac{\partial C_p^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma}}\,\mathrm{d}S\right)_{\text{approx}} = \sum_{I\in\mathcal{I}\ \mid\ p_I^M\in P'}\left[\sum_{J\in\mathcal{N}_I^m}\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}}\int_{\sigma'=\overline{\Omega}'_I\cap\overline{\Omega}'_J\cap\overline{\Omega}_p} D_p\frac{\partial C_p^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma'}}\,\mathrm{d}S\right)_{\text{approx}}\right] \tag{5.76}$$

où, en raison de l'immiscibilité des deux phases dans le volume de contrôle $\Omega'_I$, les équations du liquide et du gaz sont additionnées pour donner l'équation discrète (5.68), rappelée ci-dessous :

$$\sum_{I\in\mathcal{I}\ \mid\ p_I^M\in P'}\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}}\int_{\overline{\Omega}'_I\cap\overline{\Omega}_p}\frac{\partial C_p}{\partial t}\,\mathrm{d}V\right)_{\text{approx}}^{(n+1)} = \sum_{I\in\mathcal{I}\ \mid\ p_I^M\in P'}\left(m(\Omega'_I)\sum_{p\in\{\ell,g\}}\frac{\lambda_{p,I}C_{p,I}^{(n+1)}-\gamma_{p,I}C_{p,I}^{(n)}}{\Delta t}\right) \tag{5.77}$$

ainsi, le numérateur de l'expression du nombre de Sherwood (5.40) est donné par :

$$\begin{aligned}\langle D_\ell\nabla C_\ell\cdot\mathbf{n}\rangle &:= -\frac{1}{S_\Gamma}\int_{S_\Gamma} D_g\nabla C_g\cdot\mathbf{n}_{g\ell}\,\mathrm{d}S\\ &= -\frac{1}{S_\Gamma}\sum_{I\in\mathcal{I}\ \mid\ p_I^M\in P'}\left[\sum_{J\in\mathcal{N}_I^m}\left(\sum_{p\in\{\ell,g\}}\int_{\sigma'=\overline{\Omega}'_I\cap\overline{\Omega}'_J\cap\overline{\Omega}_p} D_p\frac{\partial C_p^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}_{I,\sigma'}}\,\mathrm{d}S\right)_{\text{approx}}\right]\\ &= -\frac{1}{S_\Gamma}\sum_{I\in\mathcal{I}\ \mid\ p_I^M\in P'}\left(m(\Omega'_I)\sum_{p\in\{\ell,g\}}\frac{\lambda_{p,I}C_{p,I}^{(n+1)}-\gamma_{p,I}C_{p,I}^{(n)}}{\Delta t}\right).\end{aligned} \tag{5.78}$$

Une étude de convergence est conduite permettant de comparer le modèle à 2-champs, combiné à ses différentes variantes de schémas temporels, au modèle 1-fluide. L'évaluation repose sur le calcul de l'erreur relative entre le nombre de Sherwood obtenu numériquement et sa valeur analytique $\varepsilon_{Sh} = |Sh_{\text{num}} - Sh_{\text{ref}}|/Sh_{\text{ref}}$. Cette dernière étant déterminée à partir du flux diffusif analytique, obtenu par dérivation de la solution analytique donnée par les relations (5.35) et (5.36).

La figure 5.19 présente l'évolution du nombre de Sherwood au cours du temps pour

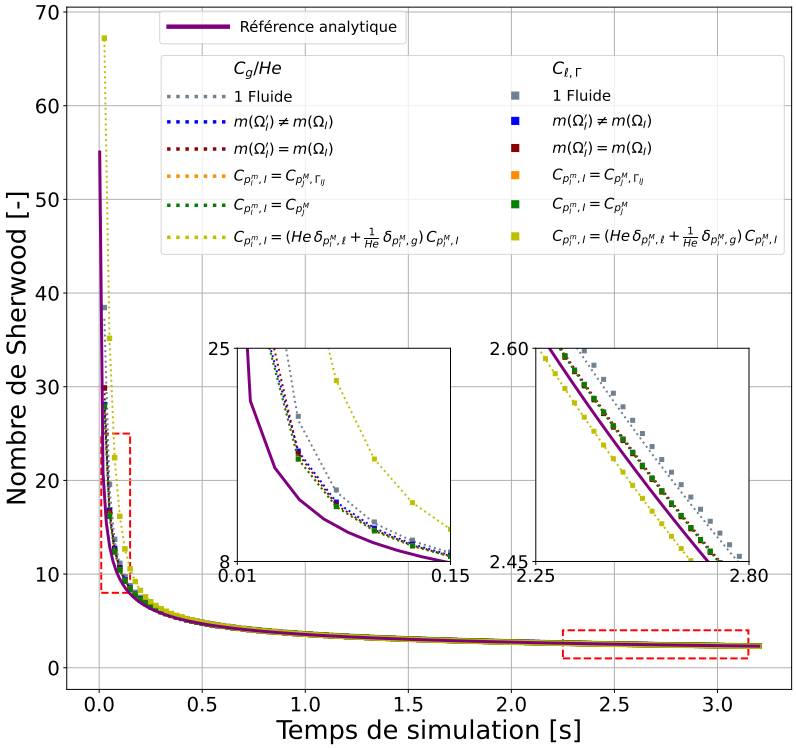



FIGURE 5.19 – Évolution du nombre de Sherwood au cours du temps pour un transfert extérieur à travers une bulle : comparaison des solutions numériques pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$.

les deux approches étudiées : le modèle à 1-fluide et le modèle à deux champs, avec ses cinq variantes de schémas temporels. Les résultats montrent que toutes ces variantes conduisent à des valeurs du nombre de Sherwood qui coïncident sur l'ensemble de l'intervalle de temps, à l'exception du schéma temporel basé sur la relation de saut de Henry, qui démarre à une valeur plus élevée et s'écarte du paquet de courbes au début de la simulation. Ils indiquent également que les deux méthodes de calcul de la concentration de liquide à l'interface $\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle$, soit en utilisant la concentration moyenne $C_g/\text{He}$, illustrée par des lignes en pointillés, ou l'intégrale de la concentration d'interface $C_{\ell,\Gamma}$ sur le contour du disque en petits carrés, donnent des résultats équivalents.

Les deux formulations numériques du nombre de Sherwood présentées précédemment, à savoir l'approche continue $Sh_1$ et l'approche discrète $Sh_2$, sont étudiées dans ce qui suit. La figure 5.20 illustre les résultats de convergence obtenus avec la première formula-

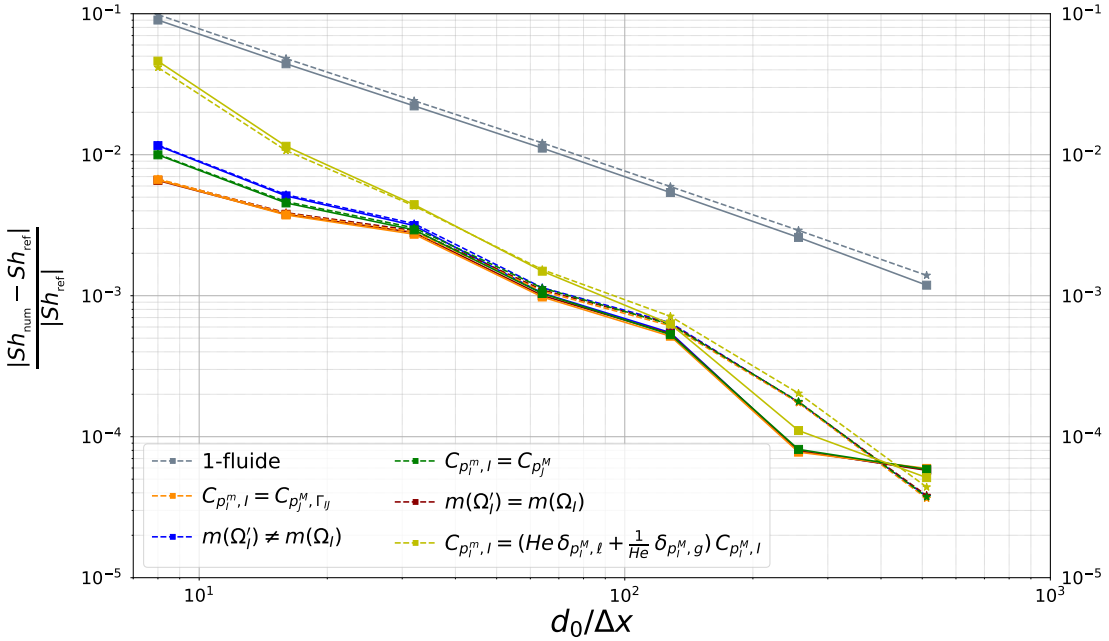



FIGURE 5.20 – Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$, exprimé à l'aide du modèle continu, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert extérieur à travers une bulle. Les traits continus indiquent la version $C_g$/He et les pointillés la version $\langle C_{\ell,\Gamma}\rangle$.

tion (continue : $Sh_1$), en considérant les deux méthodes d'évaluation de la concentration de liquide à l'interface $\langle C_{\ell,\Gamma}\rangle$ figurant au dénominateur du nombre de Sherwood (5.40). Comme pour le champ de concentration, l'étude est réalisée pour trois niveaux de raffinement temporel correspondant à $\Delta x/\Delta t = 2.5, 5$ et 10, présentés en annexe A2.

Les deux approches, à 1-fluide et à deux champs, se révèlent globalement convergentes à l'ordre 1 spatialement. De plus, les solutions issues des différentes variantes du modèle à deux champs ne présentent pas de différences significatives, ni en termes de niveau d'erreur, ni en termes d'ordre de convergence. Comme pour l'erreur sur le champ de concentration, les approches à deux champs offrent une meilleure précision, avec un gain d'environ un ordre de grandeur par rapport au modèle à 1-fluide. Enfin, on observe que, dans ce régime de transfert extérieur, où le profil de concentration dans la bulle demeure relativement uniforme, les deux manières d'évaluer la concentration à l'interface, $C_g$/He en traits continus et $C_{\ell,\Gamma}$ en pointillés, conduisent à des résultats similaires. Cela montre que, lorsque le profil de concentration reste quasi constant, les deux formulations du dénominateur sont équivalentes.

La figure 5.21 illustre les résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$ calculé à

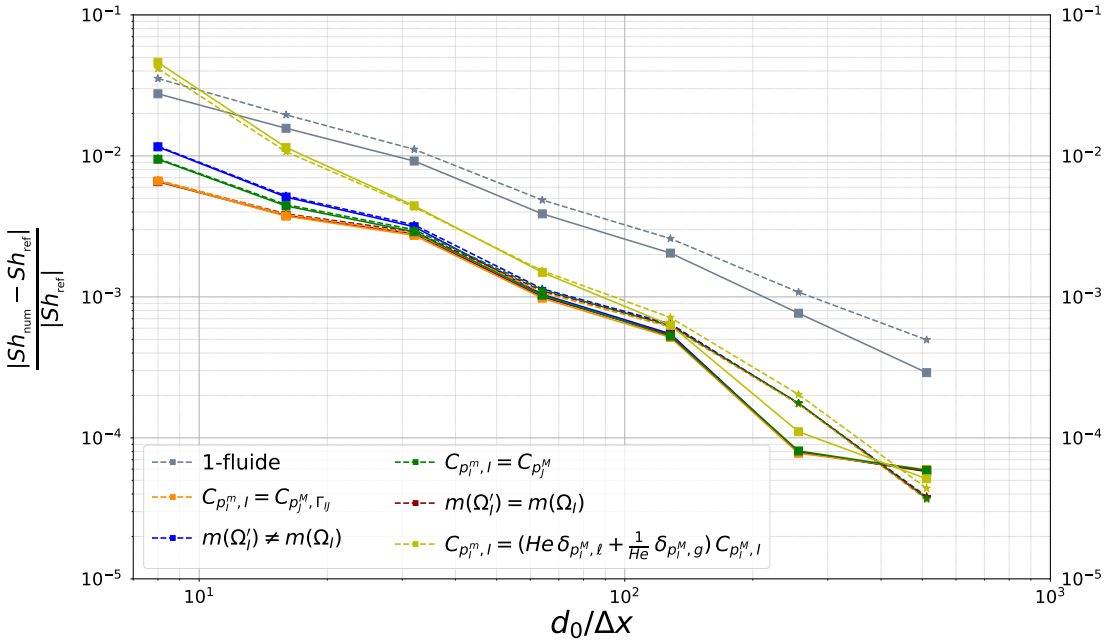



FIGURE 5.21 – Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$, exprimé à l'aide du modèle discret, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert extérieur à travers une bulle. Les traits continus indiquent la version $C_g$/He et les pointillés la version $\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle$

partir de l'expression discrète du flux de diffusion, permettant d'être compatible avec le schéma temporel utilisé. Les résultats montrent que les deux formulations du nombre de Sherwood sont équivalentes, en particulier pour le modèle à deux champs, où un même ordre de grandeur des erreurs est atteint pour toutes les variantes de schémas temporels. Cette formulation confère au modèle à 1-fluide un gain de précision d'environ un facteur 5, $\varepsilon_{Sh}$ étant réduit de $1 \times 10^{-3}$ à $2 \times 10^{-4}$ pour le maillage le plus fin ($d_0/\Delta x = 512$). Par conséquent, l'écart entre les modèles à 1-fluide et à deux champs est réduit par rapport à la formulation précédente du nombre de Sherwood $Sh_1$, où le modèle à deux champs était systématiquement d'un ordre de grandeur plus précis. Néanmoins, les niveaux d'erreur obtenus avec le modèle à 1-fluide restent toujours supérieurs à ceux du modèle à deux champs.

#### 5.3.3.2 Transfert intérieur $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \ll 1$

Afin d'examiner le mode de transfert intérieur, nous considérons le régime caractérisé par la condition $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \ll 1$. Dans ce cas, $D_A$ et $D_B$ correspondent aux coefficients de diffusion de la phase interne (liquide) et de la phase externe (gazeuse), la résistance à la diffusion étant essentiellement localisée dans la phase interne. Pour cela, nous considérons

une goutte dans une phase gazeuse au repos ($\mathbf{u} = 0$). Le coefficient de diffusion du liquide est $D_\ell = 0,17416\ \mathrm{m^2\,s^{-1}}$, celui du gaz est fixé à $D_g = 100, D_\ell$, et la constante de Henry est $\mathrm{He} = 1/30$. La goutte, de rayon $R_0$, est placée au centre d'un domaine carré identique à celui utilisé dans l'étude précédente, mais rempli cette fois par un gaz. Les conditions aux limites sont conservées, identiques à celles appliquées dans le cas de la bulle statique associée au transfert extérieur. En revanche, les conditions initiales en concentration sont inversées : $C_g(t = 0, r) = C_{g,0}(r) = 0, \quad C_\ell(t = 0, r) = C_{\ell,0}(r) = 1.$

Le profil comparatif des solutions analytiques et numériques du champ de concentration obtenu pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$ est illustré dans la figure 5.22. La courbe

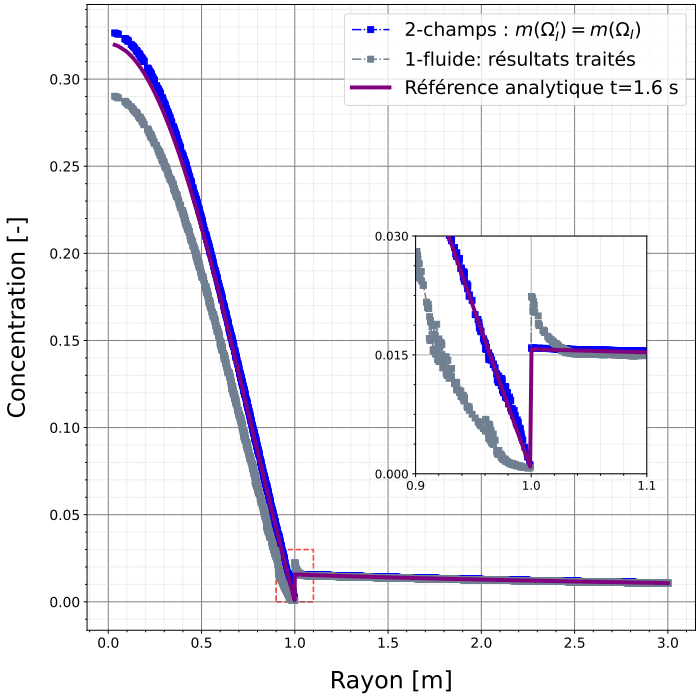



FIGURE 5.22 – Profil de concentration en fonction du rayon pour un transfert intérieur : comparaison des résultats numériques des modèles à deux champs et à 1-fluide ($1F$), traités, avec la solution exacte pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$.

bleue correspond à la solution numérique obtenue avec le modèle à deux champs et un schéma temporel classique ($m(\Omega_I') = m(\Omega_I)$), tandis que la courbe grise représente la solution reconstruite du modèle à 1-fluide, obtenue grâce à l'évaluation des variables phasiques $C_\ell$ et $C_g$ à partir de la variable de mélange $C$. De la figure, on constate que, pour ce cas de transfert de matière, la reconstruction des variables phasiques du modèle à 1-fluide tend à surestimer le saut de concentration à l'interface. Cette surestimation diminue progressivement à mesure que la résolution spatiale augmente.

**Étude de convergence sur le champs de concentration**

Afin d'évaluer la précision des différentes variantes du modèle à deux champs développées dans ce travail et de les confronter au modèle à 1-fluide, une étude de convergence est menée sur la configuration de transfert intérieur au sein d'une goutte statique immergée dans un gaz au repos. Comme pour le cas précédent, cette analyse repose sur la comparaison avec la solution analytique, au moyen du calcul de l'erreur relative en norme 2 appliquée au champ de concentration $\|C\|_{2,r}$, définie par l'expression (5.39).

Les résultats sont synthétisés sur la figure 5.23, qui présente la convergence de la solution

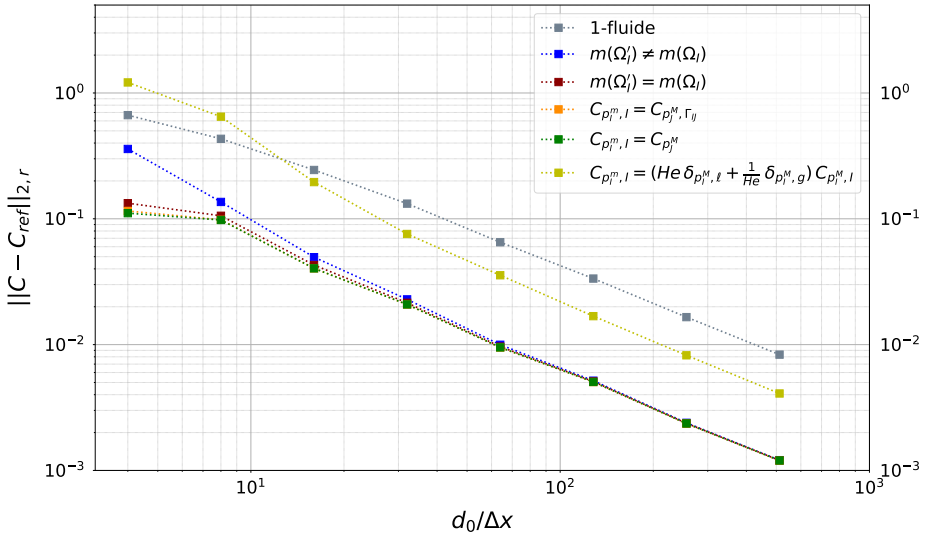



FIGURE 5.23 – Résultats de convergence du champ de concentration pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert intérieur à travers une goutte statique.

numérique du champ de concentration. Comme pour l'étude précédente, une analyse de l'effet du pas de temps a été réalisée en considérant trois niveaux de résolution temporelle : $\Delta x/\Delta t = 2.5,\ 5,\ 10$. Une convergence temporelle d'ordre 1 est ainsi observée pour les quatre variantes du modèle à deux champs (voir annexe B1). Toutefois, l'erreur générée par le schéma temporel fondé sur la relation de saut de Henry, combiné au modèle à deux champs, ainsi que celle du modèle à 1-fluide, sont indépendantes du pas de temps et ne sont gouvernées que par la résolution spatiale. Par ailleurs, la figure 5.23 montre que la solution numérique obtenue avec le modèle à deux champs, quelle que soit la variante de schéma temporel utilisée, à l'exception de celle fondée sur la relation de saut de Henry, est pratiquement identique sur toute la gamme de maillages étudiée ($d_0/\Delta x$ variant de 8 à 512). Ces variantes produisent une solution numérique environ un ordre de grandeur plus précise que celle obtenue avec le modèle à 1-fluide. Enfin, concernant l'ordre de convergence, les deux approches (modèle à deux champs et modèle à 1-fluide) présentent globalement une convergence spatiale d'ordre 1.

**Étude de convergence sur le nombre de Sherwood**

De façon analogue au mode de transfert extérieur, une étude de convergence est menée sur le nombre de Sherwood, en quantifiant les erreurs $\varepsilon_{Sh} = |Sh_{\text{num}} - Sh_{\text{ref}}|/Sh_{\text{ref}}$ associées à chacune des approches numériques.

La figure 5.24 illustre l'évolution temporelle du nombre de Sherwood exact, comparé aux

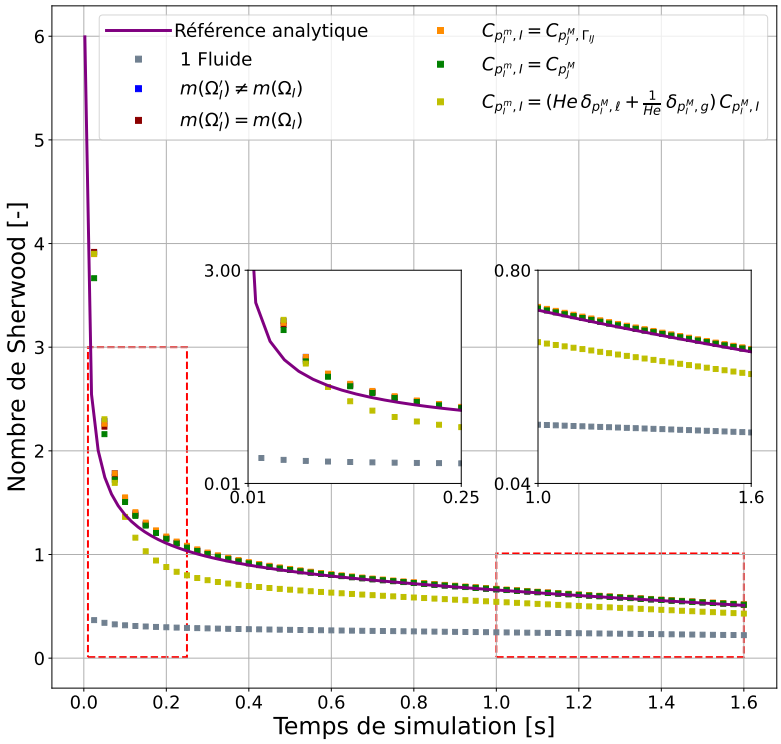



FIGURE 5.24 – Évolution du nombre de Sherwood au cours du temps pour un transfert intérieur à travers une goutte : comparaison des solutions numériques pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$.

valeurs numériques obtenues avec les deux approches de résolution : le modèle à 1-fluide et le modèle à deux champs, associé à ses cinq variantes de schémas temporels. On observe que la solution issue du modèle à 1-fluide s'écarte de celles obtenues avec les variantes du modèle à deux champs, lesquelles sont équivalentes entre elles et en meilleur accord avec la solution analytique. Cet écart est particulièrement marqué aux temps courts de la simulation. Le modèle à deux champs, couplé au schéma temporel fondé sur la relation de saut de Henry, produit quant à lui des valeurs intermédiaires, situées entre celles du modèle à 1-fluide et celles des autres variantes du modèle à deux champs. Cette tendance est confirmée par la figure 5.25, qui présente les résultats de convergence du nombre de Sherwood calculé avec l'approximation continue ($Sh_1$). On y constate que le modèle à 1-fluide génère le niveau d'erreur le plus élevé, suivi par le modèle à deux champs associé au schéma basé sur la relation de saut de Henry, tandis que toutes les autres variantes

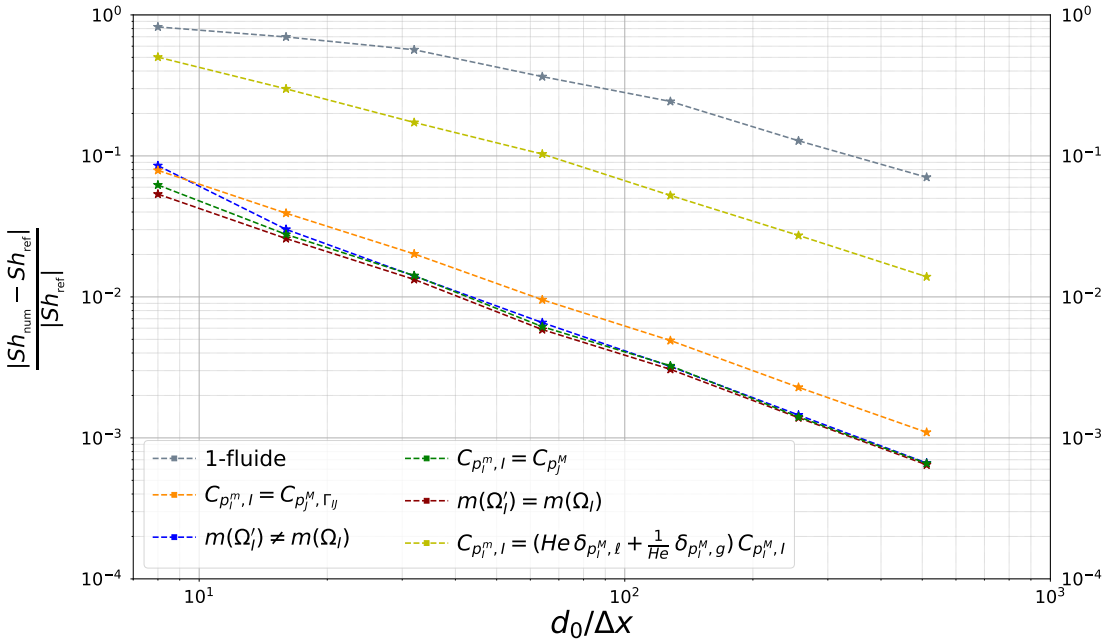



FIGURE 5.25 – Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$, exprimé à l'aide du modèle continu, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert intérieur à travers une goutte.

du modèle à deux champs fournissent des résultats équivalents, tant en termes de niveau d'erreur que d'ordre de convergence. Enfin, la figure 5.26, qui montre les résultats de

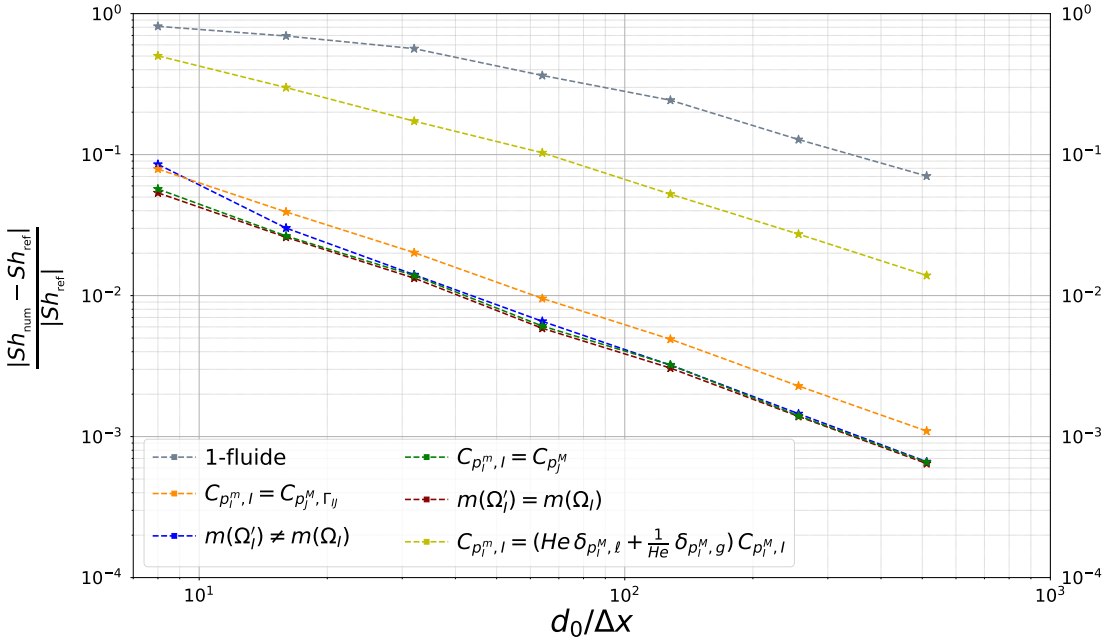



FIGURE 5.26 – Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$, exprimé à l'aide du modèle discret, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert intérieur à travers une goutte.

convergence pour la version discrète de l'approximation du nombre de Sherwood $Sh_2$, met en évidence un comportement similaire à celui observé avec la version continue, avec

des niveaux d'erreur semblables.

Comme pour le champ de concentration, la même étude est réalisée en divisant à deux reprises le pas de temps par deux, afin d'évaluer la dépendance temporelle de la précision des méthodes (voir Annexe B2).

#### 5.3.3.3 Transfert conjugué $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \simeq 1$

Dans le but de comparer les performances des deux catégories d'approches de résolution étudiées dans ce travail sur un cas de transfert de matière conjugué, nous considérons le régime $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \simeq 1$ (avec $D_A = D_{\ell,\mathrm{int}}$ et $D_B = D_{\ell,\mathrm{ext}}$). Cette condition indique que les deux phases en contact présentent des coefficients de diffusion de même ordre de grandeur. Pour ce test de validation, nous examinons un disque de rayon $R_0 = 1$ m, rempli d'un liquide et immergé dans une phase liquide immiscible au repos. Les coefficients de diffusion des fluides interne et externe au disque sont respectivement $D_{\ell,\mathrm{int}} = 0.17416\ \mathrm{m^2\,s^{-1}}$ et $D_{\ell,\mathrm{ext}} = 0.04354\ \mathrm{m^2\,s^{-1}}$, tandis que la constante de Henry est fixée à $\mathrm{He} = 0.5$. Les profils de concentration obtenus numériquement pour ce transfert de masse conjugué, avec une résolution $d_0/\Delta x = 32$, sont comparés à la solution analytique de référence, comme l'illustre la figure 5.27.

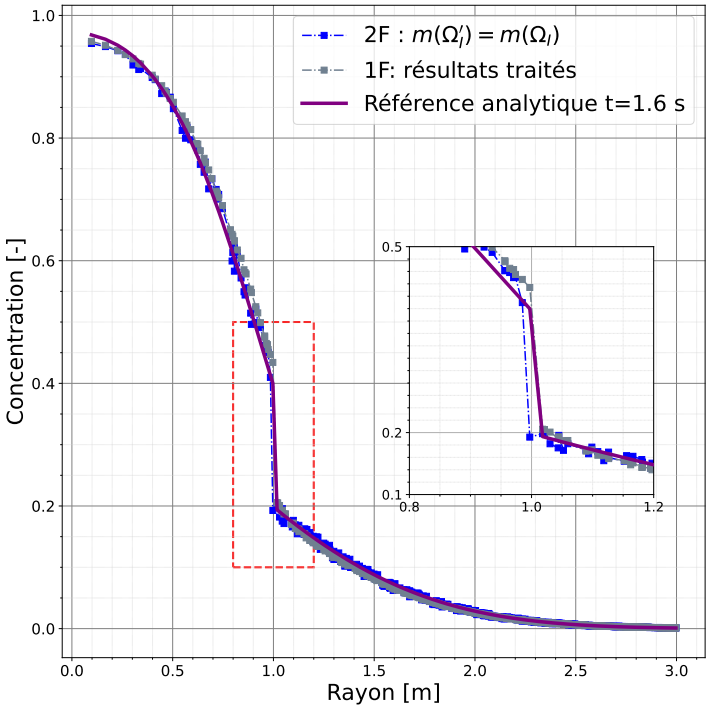



FIGURE 5.27 – Profil de concentration en fonction du rayon pour un transfert de matière conjugué : comparaison des résultats numériques des modèles à deux champs et à un fluide $(1F)$ traités, avec la solution exacte pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$.

### Étude de convergence sur le champs de concentration

Les résultats de convergence du champ de concentration présentés dans la figure 5.28 montrent que, pour ce mode de transfert conjugué, les cinq variantes du modèle à deux

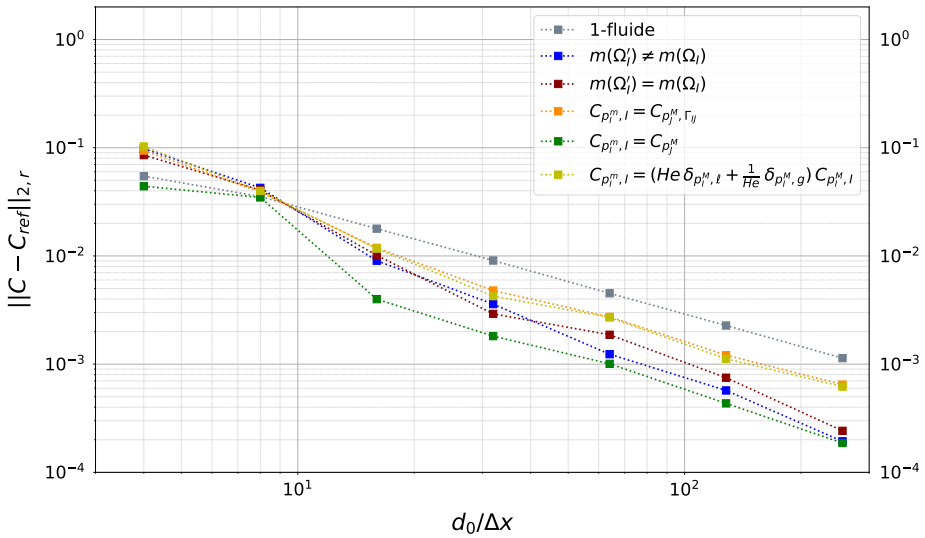



FIGURE 5.28 – Résultats de convergence du champ de concentration pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert conjugué à travers une goutte statique.

champs sont compétitives. La meilleure précision est obtenue avec le schéma temporel $C_{p_I^m,I} = C_{p_J^M}$, construit grâce à une combinaison des solutions des cellules voisines. Celui-ci garantit une réduction du niveau d'erreur d'un facteur 5 par rapport au modèle de mélange (à 1-fluide), en particulier à partir d'une résolution de 16 maille par diamètre de goutte. En revanche, pour la gamme de maillages grossiers $d_0/\Delta x = 4$ et 8, les deux approches : à 1-fluide et les cinq variantes du modèle à deux champs se montrent équivalentes.

### Étude de convergence sur le nombre de Sherwood

Dans le but d'évaluer la performance des deux familles d'approches présentées dans ce travail pour l'estimation du nombre de Sherwood dans le cadre du transfert de masse conjugué, une étude de convergence est conduite sur ce paramètre. L'analyse consiste à mesurer l'erreur générée par chaque approche, ainsi qu'à déterminer leur ordre de convergence en confrontant les résultats numériques à la solution analytique de référence. L'évolution du nombre de Sherwood au cours du temps est illustrée dans la figure 5.29 pour les deux approches numériques étudiées pour une résolution de $d_0/\Delta x = 32$. Toutes les variantes du modèle à deux champs donnent des résultats équivalents et en bon accord avec la solution analytique sur l'ensemble des maillages. À l'inverse, le modèle à un fluide s'écarte progressivement de la référence au fil de la simulation.

La précision de chaque approche est ensuite quantifiée grâce à une étude de convergence,

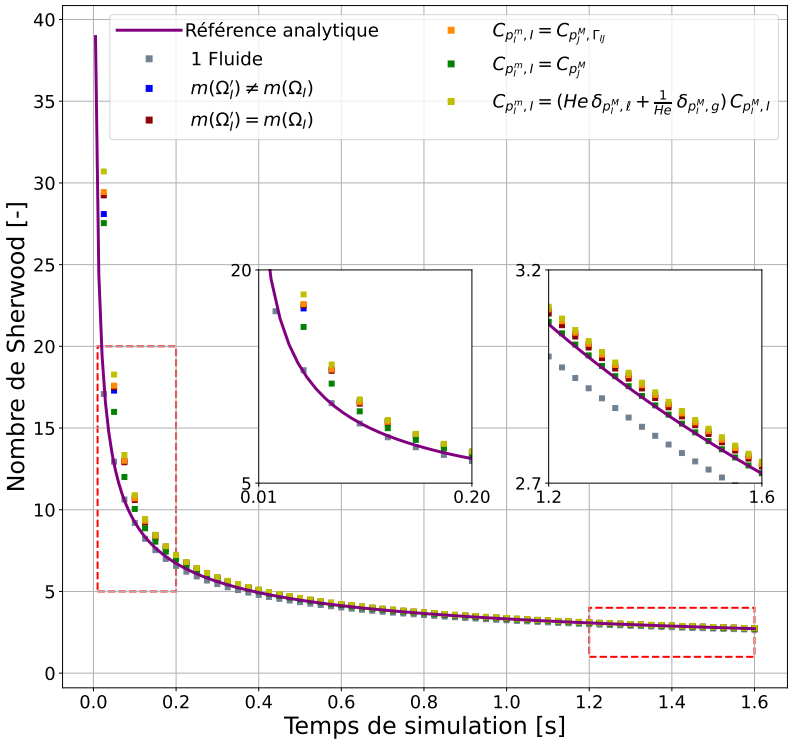



FIGURE 5.29 – Évolution du nombre de Sherwood au cours du temps pour un transfert conjugué à travers une goutte : comparaison des solutions numériques pour une résolution $d_0/\Delta x = 32$.

comme le montrent les figures 5.30 et 5.31, pour les deux formulations du calcul du Sher-

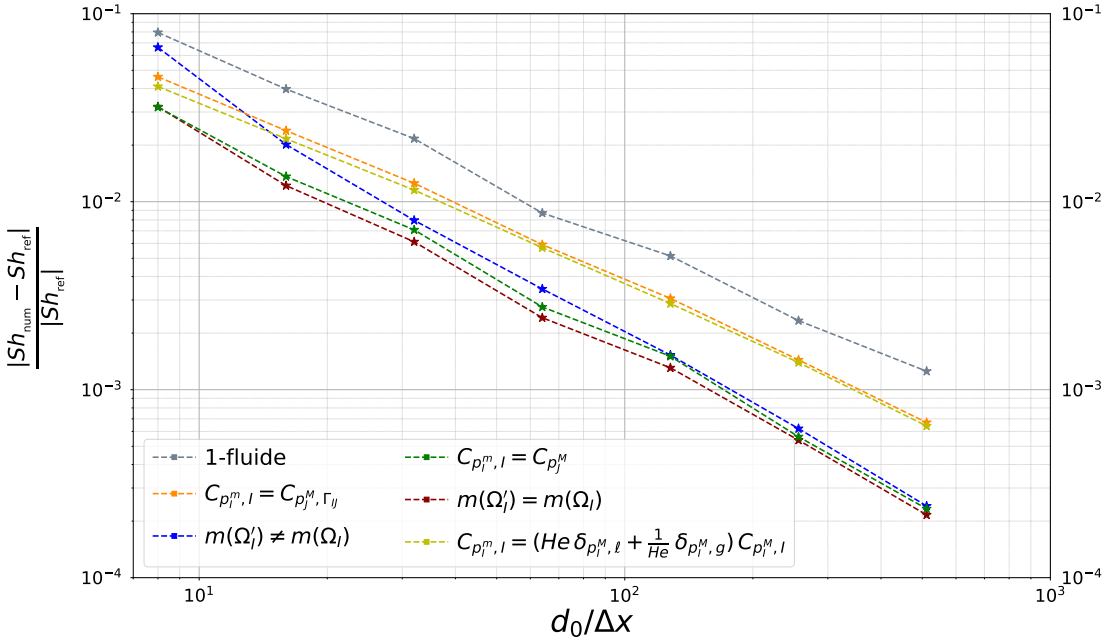



FIGURE 5.30 – Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$, exprimé à l'aide du modèle continu, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert conjugué à travers une goutte.

wood : continue ($Sh_1$) et discrète ($Sh_2$), respectivement. Les résultats montrent que le

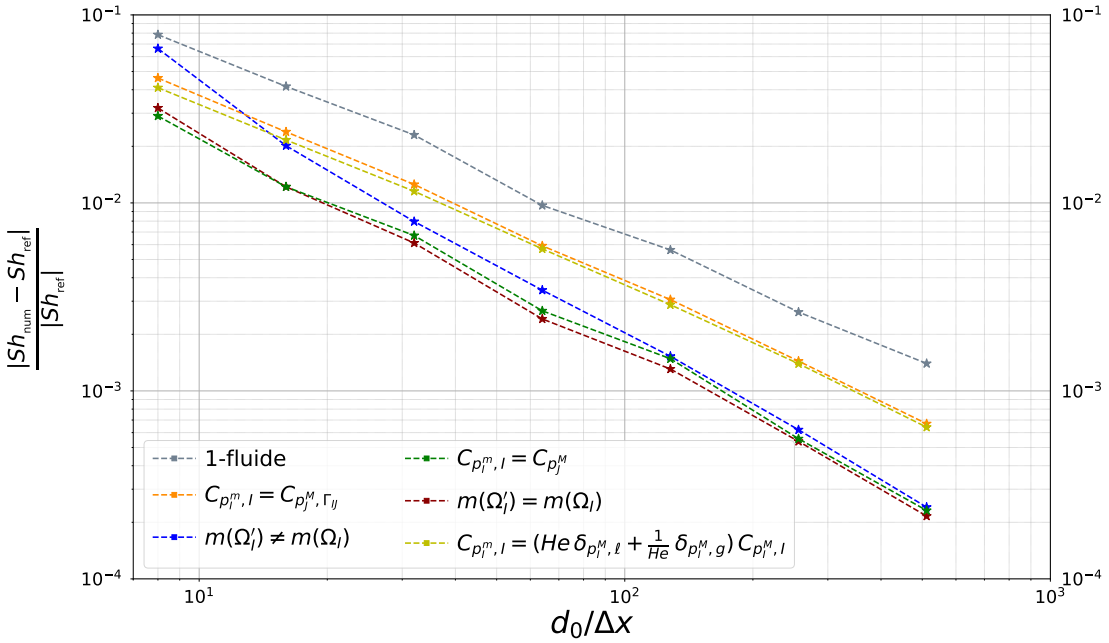



FIGURE 5.31 – Résultats de convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$, exprimé à l'aide du modèle discret, pour une résolution temporelle $\Delta x/\Delta t = 2.5$ : transfert conjugué à travers une goutte.

modèle à deux champs fournit une estimation plus précise que celle du modèle à 1-fluide. L'amélioration est notamment marquée avec les schémas temporels $m(\Omega_I') = m(\Omega_I)$, $m(\Omega_I') \neq m(\Omega_I)$ et $C_{p_I^m,I} = C_{p_J^M}$, pour lesquels un gain allant jusqu'à un facteur 7 est observé. De plus, le modèle à deux champs présente une dépendance temporelle : le niveau d'erreur diminue lorsqu'on divise le pas de temps par 2, ce qui indique que, pour ce modèle, l'erreur n'est pas uniquement pilotée par la résolution spatiale. En revanche, le modèle à 1-fluide apparaît insensible au raffinement temporel, suggérant que son erreur est déjà convergée pour toute la gamme de maillages considérée.

**Conclusion partielle**

Le modèle à deux champs, fondé sur la méthode Ghost-Fluid et associé à cinq variantes de schémas temporels, est validé et comparé au modèle à 1-fluide pour des configurations de transfert interfacial par diffusion pure. Ces configurations couvrent les trois modes de transfert de masse décrits dans la littérature. Pour une comparaison équitable, les résultats du modèle à 1-fluide ont été post-traités afin de reconstruire les concentrations phasiques $C_\ell$ et $C_g$, de manière à restituer un profil de concentration discontinu.

Pour les régimes de transfert extérieur ($\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$) et intérieur ($\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \ll 1$), malgré l'adaptation du modèle à 1-fluide à la physique discontinue du problème, le modèle à deux champs reste au moins un ordre de grandeur plus précis, tant sur le champ de concentration que sur le nombre de Sherwood, sur l'ensemble de la gamme de maillage considérée. En régime de transfert conjugué ($\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \simeq 1$), les deux modèles donnent des résultats comparables sur les maillages grossiers. À partir de $d_0/\Delta x = 16$, l'écart en faveur du modèle à deux champs atteint au moins un facteur 5.

Les variantes de schémas temporels, classique ($m(\Omega_I') = m(\Omega_I)$), à volumes de contrôle variables ($m(\Omega_I') \neq m(\Omega_I)$) et celui fondé sur une combinaison de solutions des mailles voisines ($C_{p_I^m,I} = C_{p_J^M}$) s'avèrent équivalentes, pour les deux premiers régimes, avec une meilleure convergence lorsque le pas de temps est raffiné. Pour le régime conjugué, le schéma temporel basé sur une combinaison de cellules voisines ($C_{p_I^m,I} = C_{p_J^M}$) est le plus performant. Contrairement au modèle à deux champs (ordre 1 en temps), le modèle à un fluide ne bénéficie pas du raffinement temporel, l'erreur restant dominée par la discrétisation spatiale. Contrairement au modèle à deux champs combiné aux trois schémas temporels retenus, qui montrent une convergence temporelle d'ordre 1, la précision du modèle à 1-fluide reste insensible au raffinement du pas de temps. Cette saturation indique que sa solution est déjà convergée en temps et que l'erreur résiduelle est dominée par la discrétisation spatiale.

Enfin, les deux formulations du nombre de Sherwood ($Sh_1$ et $Sh_2$) donnent des erreurs du même ordre. De plus, dans le cas du transfert extérieur, les deux façons d'exprimer la concentration à l'interface se révèlent équivalentes.

### 5.3.4 Résultats de validation des schémas de transport

Cette section est consacrée à la validation des schémas de transport présentés en section 5.3.1 en traitant le problème complet d'advection-diffusion. L'objectif est de mettre en évidence l'influence du schéma de transport sur la qualité des solutions, la précision des champs de concentration et la valeur du nombre de Sherwood. Il s'agit également d'évaluer la précision des trois méthodes de reconstruction de la solution dans la phase minoritaire, non résolue dans les cellules diphasiques. La connaissance de la solution dans cette phase est indispensable pour qu'elle puisse être advectée avec les flux géométriques de la VOF (assurant ainsi un déplacement synchronisé avec la fraction volumique $\alpha$). Chaque méthode de reconstruction est combinée aux quatre variantes de schémas temporels retenues dans la section précédente. Les solutions numériques sont ensuite confrontées aux références analytiques afin d'estimer les erreurs induites par chaque approche et de les comparer au modèle à 1-fluide. Deux configurations sont étudiées : la rotation en bloc d'un disque 2D, testée sur les trois modes de transfert de masse décrits en section 2.2.3, et la translation d'une bulle 3D à vitesse imposée. Dans ces deux configurations, la solution stationnaire est toujours valide puisqu'elle est exprimée dans le repère mobile.

#### 5.3.4.1 Rotation en bloc d'un disque 2D

Dans cette rubrique, une étude de convergence est menée afin de démontrer l'effet du schéma de transport sur la qualité des solutions. Pour cela, les deux principaux paramètres du transfert de masse sont analysés :

— le champ de concentration
— le coefficient de transfert de masse adimensionnel, représenté par le nombre de Sherwood.

L'analyse est réalisée sur un disque de dimension $R_0/L = 0.025$ en rotation en bloc, permettant de combiner l'impact des deux composantes du champ de vitesse. Les conditions aux limites ainsi que la géométrie sont identiques à celles du problème de diffusion pure, comme illustré en figure 5.32, à l'exception du champ de vitesse. Ici, l'écoulement n'est plus nul, mais défini par une vitesse de rotation $\mathbf{u} = a\Big((y - y_c)\,\mathbf{e}_x + (x - x_c)\,\mathbf{e}_y\Big)$, où $\mathbf{x}_c = (x_c, y_c)$ est la position de l'axe de rotation et $a$ une constante de normalisation telle que $\|\mathbf{u}(x_0, y_0)\| = 1$. Les phases ainsi que le champ de concentration sont initialisés à une position $(x_0, y_0) = (-2, 0)$, avec les mêmes valeurs que dans la section précédente. L'erreur est évaluée au temps final $t_f\ D_\ell/R_0^2 \approx 0.5$ pour le mode de transfert extérieur et $t_f\ D_\ell/R_0^2 \approx 0.3$ pour les modes de transfert intérieur et conjugué. La solution analytique est obtenue en considérant la vitesse angulaire à la position instantanée du centre du disque. Dans ce référentiel mobile, le problème reste équivalent à un problème de diffusion instationnaire.

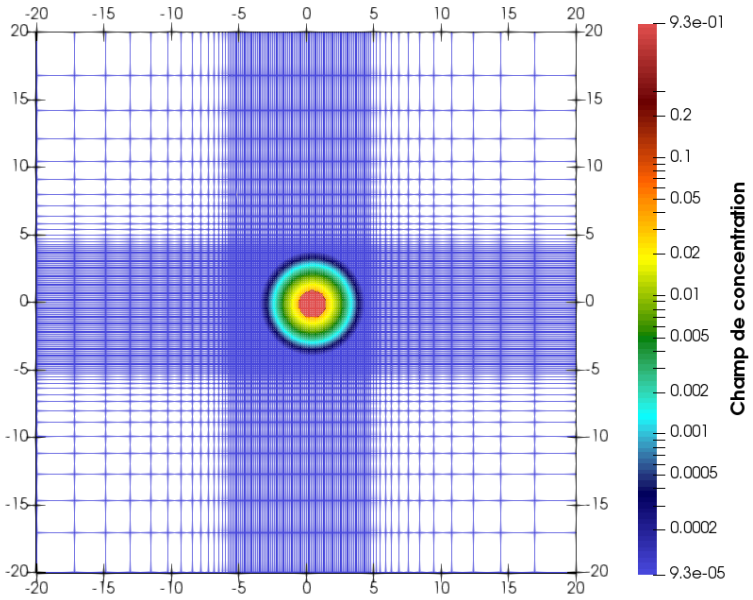



FIGURE 5.32 – Illustration du domaine de calcul et du champ de concentration au temps de simulation $t = 3.2, \mathrm{s}$, pour une résolution $d_0/\Delta x = 16$.

### Évolution temporelle du nombre de Sherwood

Avant de procéder à l'étude de convergence destinée à évaluer la précision des schémas de transport et leur influence sur la précision du modèle à deux champs, il est d'abord nécessaire d'examiner leur capacité à limiter les fluctuations du nombre de Sherwood au cours du temps observées en section 5.2.4. En effet, il s'agit d'évaluer la capacité de la stratégie de transport utilisant les flux géométriques de la VOF, après le splitting des équations décrit à la section 5.3, à atténuer les fortes oscillations du nombre de Sherwood induites par un transport désynchronisé entre le champ de concentration et la fraction volumique. La figure 5.33 illustre l'évolution temporelle de ce paramètre pour le cas d'une bulle 2D en rotation. On y constate que cette stratégie permet effectivement de lisser les fluctuations du nombre de Sherwood en assurant un transport synchronisé entre le champ de concentration et la fraction volumique.

**Transfert extérieur $He\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$ :** comme pour le test statique, on examine ici le mode de transfert extérieur à travers une bulle en rotation. Les propriétés physiques, telles que les coefficients de diffusion et la constante de Henry, sont identiques à celles du cas statique (voir 5.3.3.1). Comme précisé précédemment, les trois méthodes d'approximation de la solution dans la phase minoritaire des mailles mixtes du modèle à deux champs sont comparées, ainsi qu'au modèle à 1-fluide. La comparaison repose sur l'estimation de l'erreur en norme 2 du champ de concentration et sur la valeur du nombre de Sherwood,

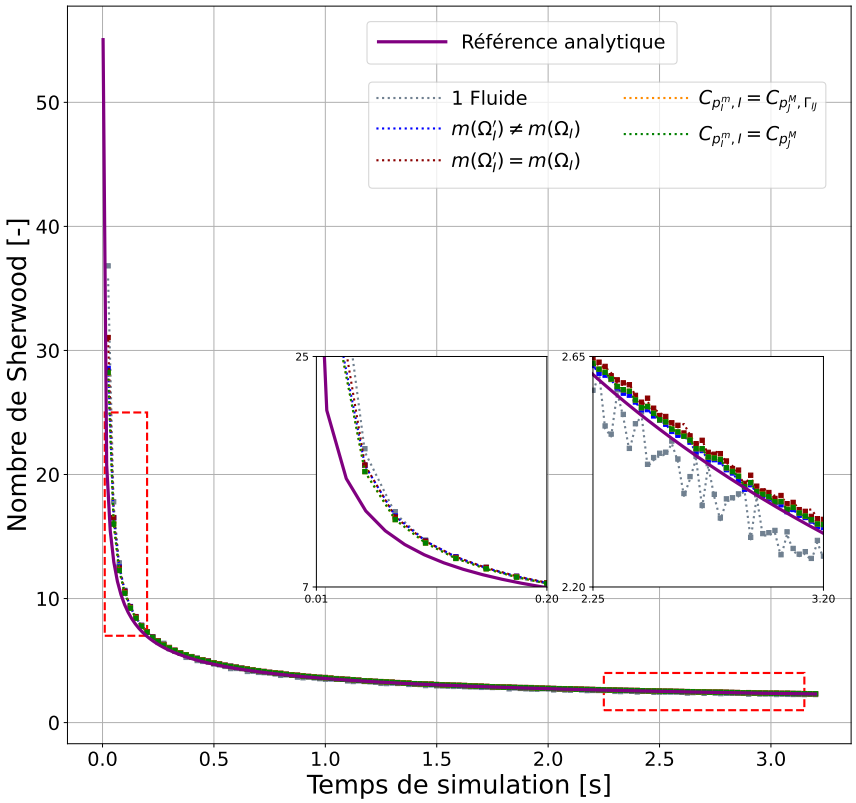
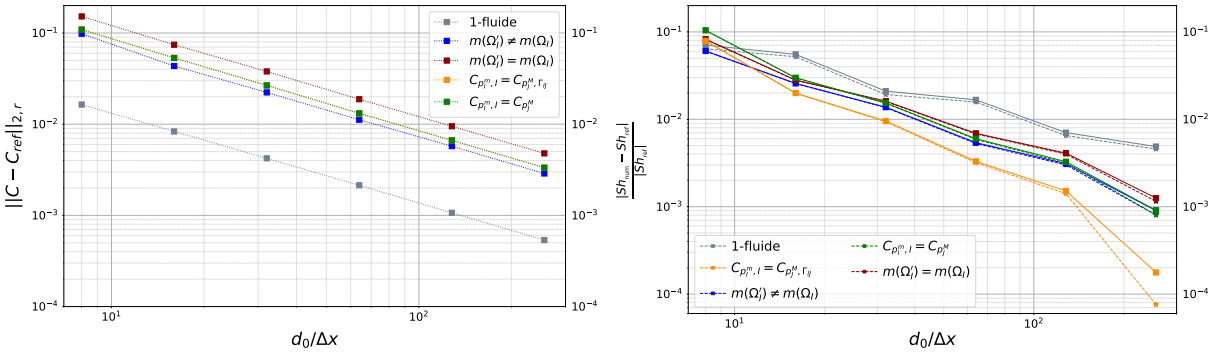



FIGURE 5.33 – Evolution temporelle du nombre de Sherwood pour le cas d'une bulle 2D en rotation, pour une résolution $d_0/\Delta x = 8$.

obtenues pour chaque approche et confrontées à la solution analytique de référence. La même démarche est appliquée aux trois modes de transfert de masse.

**Approximation par la condition de saut :** dans ce test de validation du schéma de transport, on évalue la précision de l'approche consistant à reconstruire la solution de phase minoritaire non résolue des mailles diphasiques à l'aide de la relation de saut de Henry, afin de la transporter avec le schéma géométrique VOF, comme expliqué en section 5.3.1.1.

Les figures 5.34a et 5.34b présentent respectivement les résultats de convergence du champ de concentration et du nombre de Sherwood ($Sh_2$). La figure 5.34a montre que l'ajout du transport ne dégrade pas la précision du modèle à 1-fluide, qui conserve un niveau d'erreur comparable à celui du cas purement diffusif illustré sur la figure 5.18. En revanche, la précision du modèle à deux champs est fortement affectée par l'ajout du transport, où une augmentation du niveau d'erreur est observée par rapport au cas de bulle statique. On observe également que, pour l'ensemble des maillages considérés, toutes les variantes des schémas temporels du modèle à deux champs produisent des résultats moins précis que ceux obtenus avec le schéma du modèle à 1-fluide, dans le cadre de cette méthode de reconstruction de la variable minoritaire pour le transport.

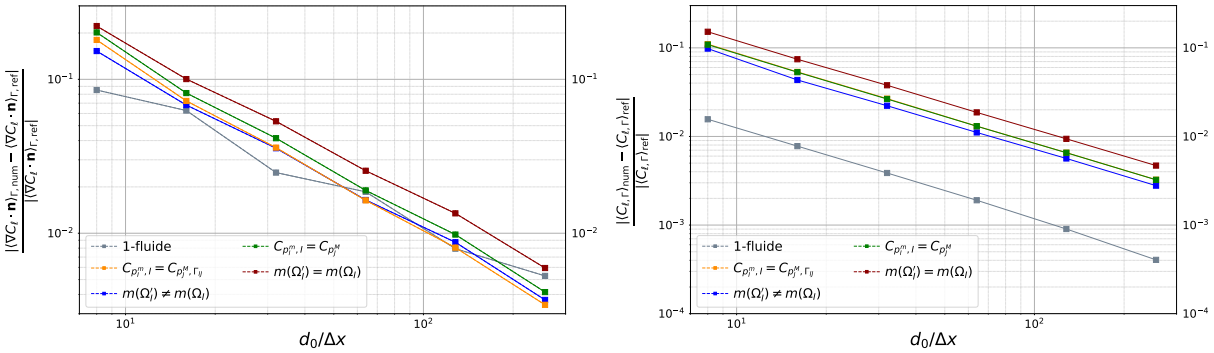



(a) (b)

FIGURE 5.34 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue à partir de la relation de saut de Henry : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert extérieur à travers une bulle en rotation. Les traits continus indiquent la version $C_g$/He et les pointillés la version $\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle$.

Concernant les résultats de convergence du nombre de Sherwood, présentés sur la figure de droite (5.34b), on remarque que les quatre variantes des schémas temporels du modèle à deux champs conduisent à des niveaux d'erreur similaires. Leur précision est comparable à celle du modèle à 1-fluide pour les maillages grossiers. Toutefois, à mesure que la résolution se raffine, l'écart augmente en faveur du modèle à deux champs, en particulier avec le schéma temporel $C_{p_I^m,I} = C_{p_J^M,\Gamma_{ij}}$, construit à partir d'une combinaison de concentrations interfaciales dans la maille d'intérêt et son voisinage. De plus, les résultats illustrés sur la figure 5.34b montrent une inversion des tendances entre la précision du modèle à 1-fluide et celle du modèle à deux champs, par rapport aux observations de la figure 5.34a. Cela indique que la bonne qualité de la solution fournie par le modèle à 1-fluide sur le champ de concentration ne se traduit pas directement par une meilleure précision du nombre de Sherwood.

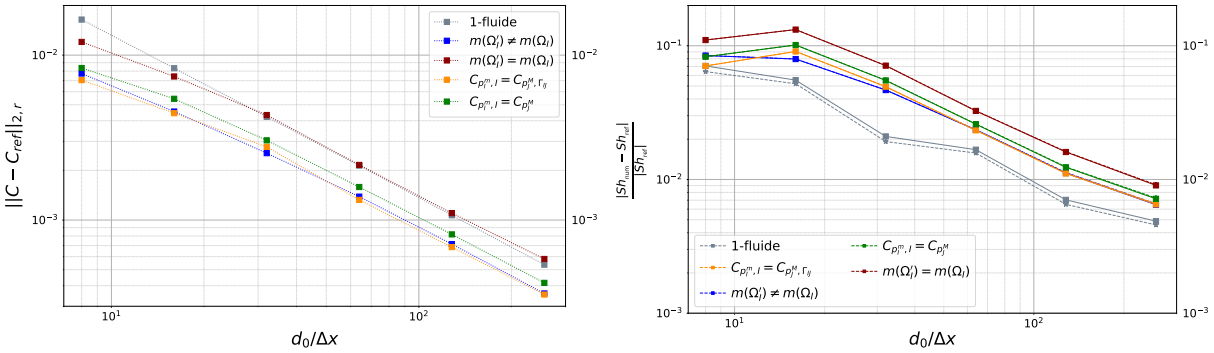
Afin d'examiner plus en détail ce point, une étude de convergence a été réalisée séparément sur le numérateur et le dénominateur du nombre de Sherwood, représentant respectivement le flux diffusif 5.35a et la concentration interfaciale 5.35b. L'analyse des résultats met en évidence qu'une meilleure précision est obtenue avec le modèle à 1-fluide pour chacune de ces grandeurs considérées séparément, ce qui révèle qu'un effet de compensation est introduit par le rapport des deux termes.




(a) (b)

FIGURE 5.35 – Résultats de convergence du flux diffusif (a) et de la concentration interfaciale $\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle$ (b), pour les approches numériques : à 1-fluide et à deux champs, associées aux différentes variantes de schémas temporels.

**Approximation par une combinaison des cellules voisines :** le but de cette partie est d'évaluer les performances du schéma de transport reposant sur une reconstruction de la solution dans la phase non résolue des cellules diphasiques, obtenue par une combinaison des valeurs de son voisinage. La figure de gauche 5.36a présente les résultats




(a) (b)

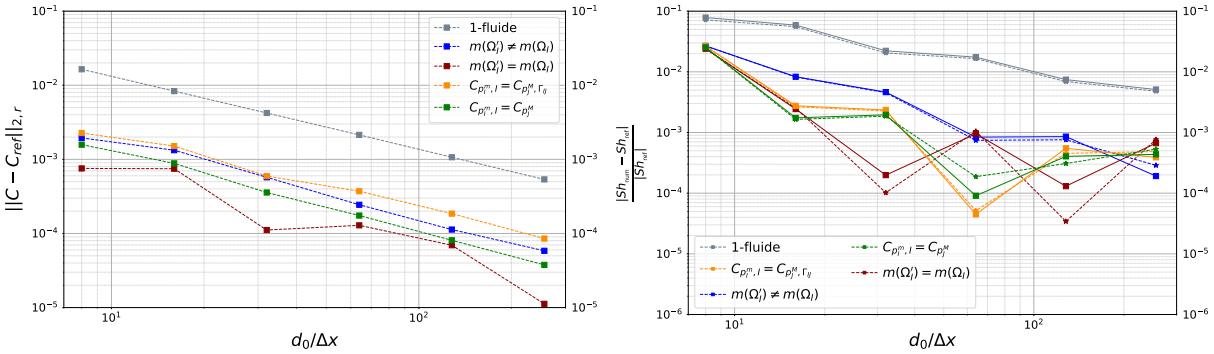
FIGURE 5.36 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des cellules voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert extérieur à travers une bulle en rotation. Les traits continus indiquent la version $C_g$/He et les pointillés la version $\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle$.

de convergence du champ de concentration. On y observe que la précision du modèle à deux champs est nettement améliorée par rapport à l'approche précédente, où la phase minoritaire des cellules coupées par l'interface était reconstruite directement à partir de la relation de saut. En effet, les résultats montrent que, pour toutes les variantes des schémas temporels, les erreurs sont désormais réduites d'un ordre de grandeur, avec le

schéma temporel classique ($m(\Omega_I') = m(\Omega_I)$) atteignant une précision comparable à celle du modèle à 1-fluide. Toutefois, par rapport au cas de pure diffusion, les résultats restent moins précis : les erreurs introduites par ce schéma de transport détériorent la précision du modèle à deux champs.

La figure de droite 5.36b illustre les résultats de convergence du nombre de Sherwood. Elle montre qu'avec ce schéma de transport, les deux approches à 1-fluide et à deux champs, combinées à toutes les variantes du schéma temporel confondues, présentent des précisions de même ordre de grandeur, avec néanmoins un léger avantage en faveur du modèle à 1-fluide.

**Approximation par une concentration interfaciale :** comme précédemment, l'objectif de ce test de validation est d'analyser l'influence du schéma de transport sur la précision du modèle à deux champs. Dans cette approche, la phase minoritaire des cellules mixtes est reconstruite en combinant les concentrations interfaciales issues des cellules diphasiques voisines. La figure 5.37a montre que cette variante du schéma de transport




(a) (b)

FIGURE 5.37 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert extérieur à travers une bulle en rotation. Les traits continus indiquent la version $C_g$/He et les pointillés la version $\langle C_{\ell,\Gamma} \rangle$.

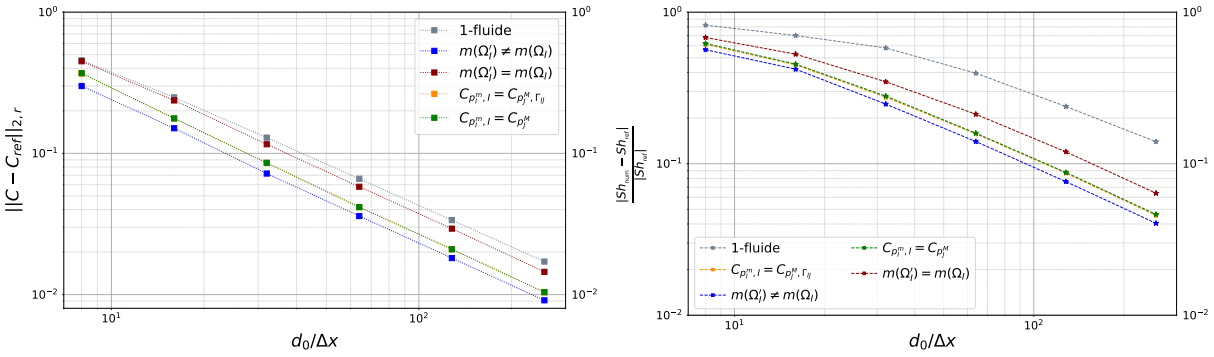
améliore nettement la convergence de la solution du modèle à deux champs. Comparée aux deux approches précédentes, elle offre une précision supérieure jusqu'à un ordre de grandeur par rapport à la reconstruction basée sur une combinaison des cellules voisines, et d'au moins deux ordres par rapport à celle fondée sur la relation de saut de Henry. De plus, par rapport au cas statique de diffusion pure, l'ajout du transport avec ce schéma ne dégrade pas la précision du modèle à deux champs : les erreurs restent du même ordre de grandeur. Ces résultats permettent d'identifier cette version du schéma de transport,

combinée au schéma temporel standard $m(\Omega'_I) = m(\Omega_I)$, comme étant la plus pertinente.

La figure 5.37b confirme cette tendance en montrant que les résultats du nombre de Sherwood sont également améliorés par rapport aux deux variantes précédentes, malgré une convergence moins régulière. Enfin, pour les deux paramètres évalués ci-dessus, le schéma temporel standard $m(\Omega'_I) = m(\Omega_I)$ se révèle le plus performant lorsqu'il est combiné avec ce schéma de transport.

**Transfert intérieur** $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \ll 1$ **:** par analogie avec le cas statique de la section 5.3.3.2, le mode de transfert intérieur est étudié à l'aide d'une goutte en rotation, caractérisée par les mêmes propriétés physiques que celui-ci. En appliquant la même méthodologie que pour l'étude précédente de transfert de masse à travers une bulle (transfert extérieur, $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$), on évalue la performance des trois approches de reconstruction de la solution dans la phase minoritaire, non résolue dans les mailles mixtes. La connaissance de cette variable est en effet nécessaire pour le transport géométrique de la VOF, qui consiste à advecter séparément la concentration de chaque phase.

**Approximation par la condition de saut :** comme pour le cas du transfert de masse à travers une bulle, on commence par analyser la première approche de reconstruction de la solution dans la phase non résolue. À cet effet, les résultats de convergence du champ de concentration et du nombre de Sherwood sont présentés respectivement sur les figures 5.38a et 5.38b. Pour le champ de concentration, l'ajout du transport avec ce




(a) (b)

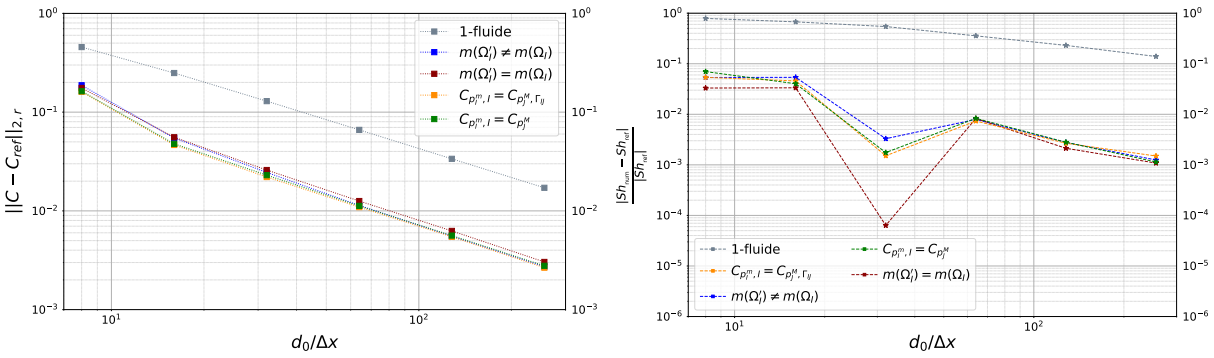
FIGURE 5.38 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue à partir de la relation de saut de Henry : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert intérieur à travers une goutte en rotation.

schéma conduit à des performances similaires pour les deux modèles (à 1-fluide et à deux champs), qui génèrent des erreurs du même ordre de grandeur. La meilleure précision est

toutefois obtenue avec le modèle à deux champs associé au schéma temporel basé sur des volumes variables $m(\Omega'_I) \neq m(\Omega_I)$, comme illustré sur la figure de gauche (5.38a).

Le même constat s'applique au nombre de Sherwood : ce schéma temporel fournit les résultats les plus précis sur l'ensemble des maillages testés. L'amélioration par rapport au modèle à un fluide est particulièrement marquée pour les résolutions fines, avec un gain d'au moins un facteur 3. Pour ce mode de transfert intérieur, la précision du modèle à deux champs s'avère donc meilleure que dans le cas précédent pour ce même schéma de transport. Néanmoins, l'ajout du transport avec le présent schéma induit une erreur supérieure à celle du cas statique de pure diffusion présenté sur la figure 5.23.

**Approximation par une combinaison des cellules voisines :** comme pour le premier mode de transfert de masse (transfert extérieur, $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$), cette deuxième approche de reconstruction de la variable non résolue dans les cellules diphasiques, utilisée dans le schéma de transport, améliore la précision du modèle à deux champs par rapport à l'approche précédente. En effet, des résultats plus précis sont obtenus avec ce schéma, aussi bien pour le champ de concentration où une amélioration d'un facteur 3 est observée, que pour le nombre de Sherwood, où le niveau d'erreur est amélioré d'environ une décade et demie, comme le montrent les figures 5.39a et 5.39b. La comparaison avec la situation




(a) (b)

FIGURE 5.39 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des cellules voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert intérieur à travers une goutte en rotation.

statique du même mode de transfert révèle toutefois que l'ajout du transport avec ce second schéma dégrade légèrement la précision du modèle à deux champs. Notamment, pour la résolution la plus fine ($d_0/\Delta x = 256$), l'erreur reste environ trois fois plus élevée que dans le cas purement diffusif.

**Approximation par une concentration interfaciale :** ce schéma de transport, où la concentration de la phase non résolue des mailles mixtes est définie à partir de la définition de la concentration interfaciale, s'avère le plus performant pour ce mode de transfert de masse. Il permet d'obtenir la même précision que le cas statique, comme l'illustrent les figures 5.40a et 5.40b : le niveau d'erreur sur le champ de concentration

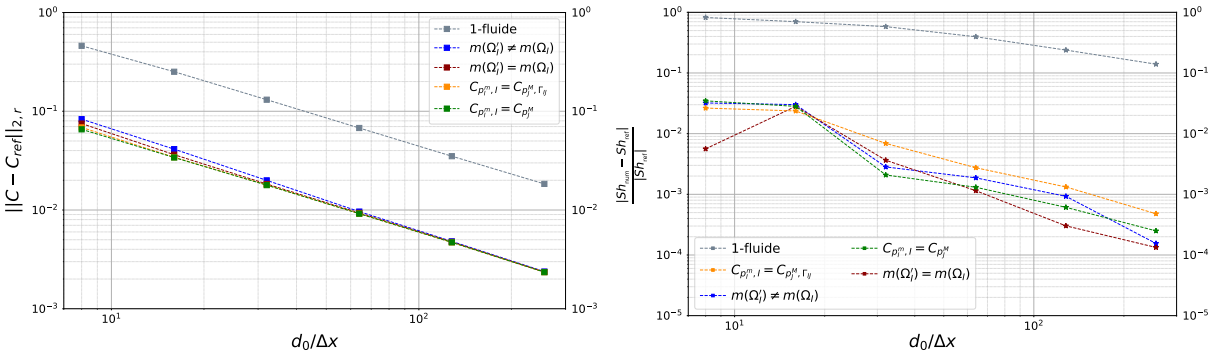


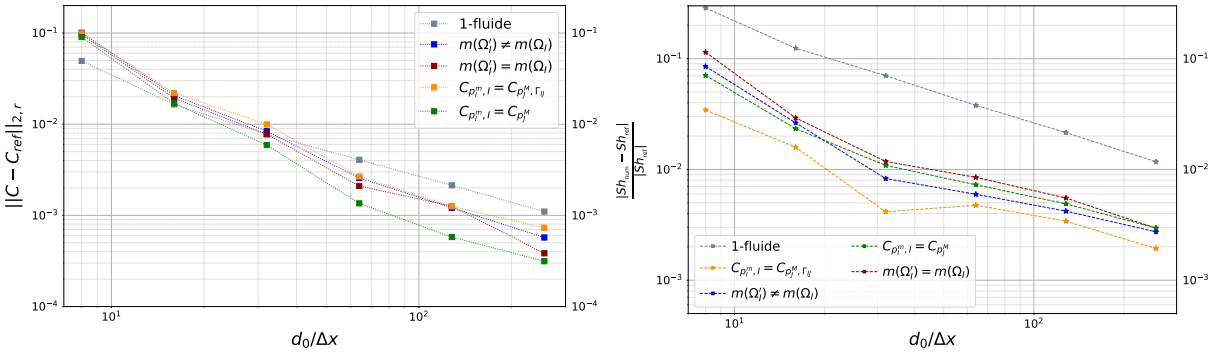

FIGURE 5.40 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert intérieur à travers une goutte en rotation.

et sur le nombre de Sherwood est comparable à celui du cas purement diffusif, avec une précision équivalente obtenue pour toutes les variantes du schéma temporel.

**Transfert conjugué** $\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \simeq 1$ **:** ce test porte sur le mode de transfert conjugué à travers un disque 2D en rotation. La configuration étudiée est analogue à celle présentée dans le test statique en section 5.3.3.3.

**Approximation par la condition de saut :** contrairement aux deux modes de transfert précédents : extérieur ($\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$) et intérieur ($\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \ll 1$), le mode de transfert conjugué se distingue. Dans ce cas, la première approche de reconstruction de la phase minoritaire appliquée au schéma de transport offre une précision comparable à celle du cas statique. Ce constat vaut aussi bien pour le champ de concentration que pour le nombre de Sherwood, montrant que l'ajout du transport par ce schéma ne dégrade ni la précision du modèle à deux champs ni celle du modèle à 1-fluide.

Les résultats de convergence du champ de concentration illustrés sur la figure 5.41a, montrent que les deux modèles : à deux champs et à 1-fluide, sont équivalents sur les maillages grossiers, quelle que soit la variante du schéma temporel. En revanche, à mesure que le maillage se raffine, le modèle à deux champs se révèle plus précis, permettant une réduction du niveau d'erreur d'au moins un facteur 3. Enfin, pour les résultats de convergence du nombre de Sherwood présentés sur la figure 5.41b, le modèle à deux champs

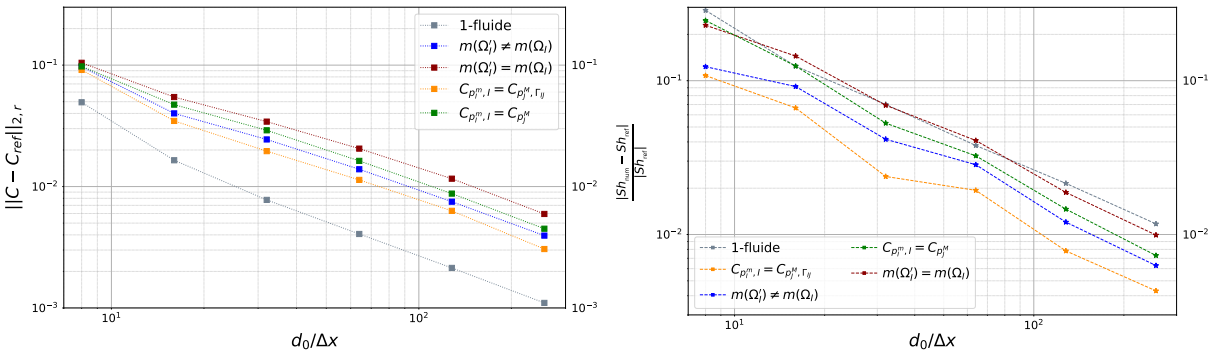



(a) (b)

FIGURE 5.41 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue à partir de la relation de saut de Henry : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert intérieur à travers une goutte en rotation.

surpasse systématiquement le modèle à 1-fluide sur l'ensemble des maillages testés.

**Approximation par une combinaison des cellules voisines :** pour le mode de transfert de masse conjugué, l'ajout du transport via ce schéma dégrade fortement la précision du modèle à deux champs. En effet, comme l'illustrent les résultats de convergence du champ de concentration et du nombre de Sherwood en figures 5.42a et 5.42b, Le




(a) (b)

FIGURE 5.42 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des cellules voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert conjugué à travers une goutte en rotation.

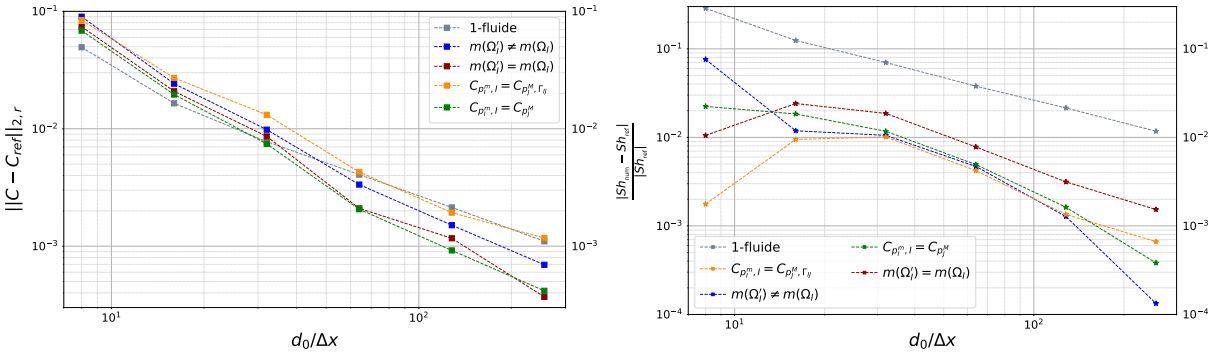
niveau d'erreur sur le champ de concentration augmente globalement d'un facteur 10 par rapport aux résultats du schéma précédent, et d'un facteur 2 pour le nombre de Sherwood.

Ce résultat est surprenant, car pour les deux autres modes de transfert, extérieur et intérieur, présentés précédemment, ce schéma offrait une précision intermédiaire entre celle de la première approche : où la concentration de la phase non-résolue dans les cellules

diphasiques est estimée à partir de la relation de saut de Henry, et celle fondée sur une combinaison des concentrations interfaciales des mailles mixtes voisines. Cette tendance se vérifiait aussi bien pour la solution que pour le nombre de Sherwood.

**Approximation par une concentration interfaciale :** comme attendu, et de manière analogue aux deux autres modes de transfert de masse, cette dernière variante du schéma de transport offre une précision proche de celle du cas statique de pure diffusion présenté en section 5.3.3.3, aussi bien pour la solution que pour le nombre de Sherwood. Elle permet ainsi de réduire l'erreur introduite par le schéma de transport et de préserver la précision du modèle à deux champs après l'ajout du transport.

Pour le champ de concentration, les deux modèles : à 1-fluide et à deux champs, quelle que soit la variante temporelle utilisée, donnent des résultats équivalents sur l'ensemble des maillages grossiers, comme illustré sur la figure 5.43a. En revanche, pour le nombre




(a) (b)

FIGURE 5.43 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert conjugué à travers une goutte en rotation.

de Sherwood, le modèle à deux champs se révèle plus performant. Toutes les variantes du schéma temporel y sont compétitives, offrant globalement un gain d'un ordre de grandeur.

### 5.3.4.2 Translation de bulle 3D

Dans le présent cas test, le cas statique est revisité en imposant un écoulement non nul, qui correspond à une translation uniforme dans la direction $\mathbf{e}_x$, avec $u_x = 1\ \mathrm{m\,s^{-1}}$. La longueur du domaine principal est doublée dans cette direction ($L = 16$ m), de même que le nombre de mailles, afin de conserver une discrétisation constante de la structure diphasique dans chaque direction. Les conditions initiales, les conditions aux limites ainsi que le temps final de simulation sont identiques à ceux du régime de transfert extérieur ($\mathrm{He}\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$)

présenté dans la section précédente. Enfin, toutes les simulations sont réalisées avec une valeur de CFL fixée à 0,3. La figure 5.44 illustre la géométrie et le maillage du domaine de calcul. La solution analytique utilisée pour les tests de convergence effectués dans ce cas correspond à une solution de diffusion instationnaire, de part et d'autre de l'interface d'une bulle sphérique, donnée dans les travaux de Farsoiya, Popinet et Deike [46].

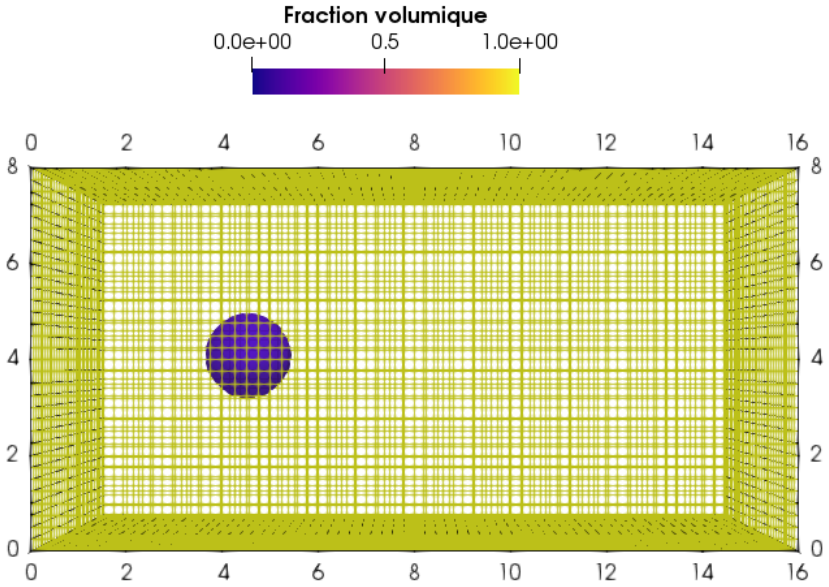



Figure 5.44 – Illustration de la géométrie 3D et du maillage du domaine de calcul pour une résolution $d_0/\Delta x = 8$.

### Évolution temporelle du nombre de Sherwood

De façon analogue au cas de la bulle 2D en rotation, la figure 5.45 illustre l'évolution temporelle du nombre de Sherwood calculé avec les deux catégories de méthodes : à 1-fluide et à deux champs, en regard de la solution analytique de référence. Ces résultats confirment le constat précédent : la stratégie consistant à advecter le champ de concentration avec les flux géométriques permet de résoudre le problème des fortes oscillations observées dans la section 5.2.4, où les parties advection et diffusion de l'équation de concentration étaient résolues de manière couplée. De plus, il est observé sur la figure qu'aux temps courts de simulation, le modèle à 1-fluide génère la solution qui s'écarte le plus de la référence analytique. En revanche, à mesure que le temps de simulation augmente, celui-ci devient le plus proche de la référence, suivi par le modèle à deux champs combiné au schéma temporel $m(\Omega_I') = m(\Omega_I)$.

Comme dans la section précédente, des études de convergence ont été menées afin d'évaluer la précision des trois variantes de ces schémas sur une configuration de bulle 3D en translation à vitesse constante.

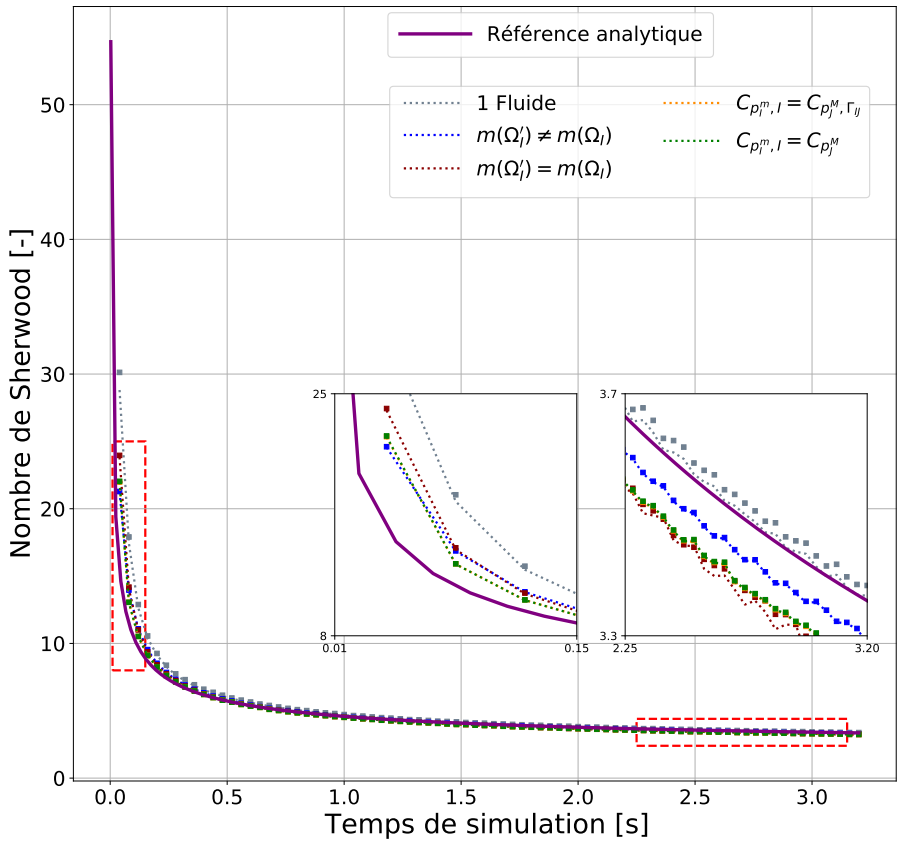
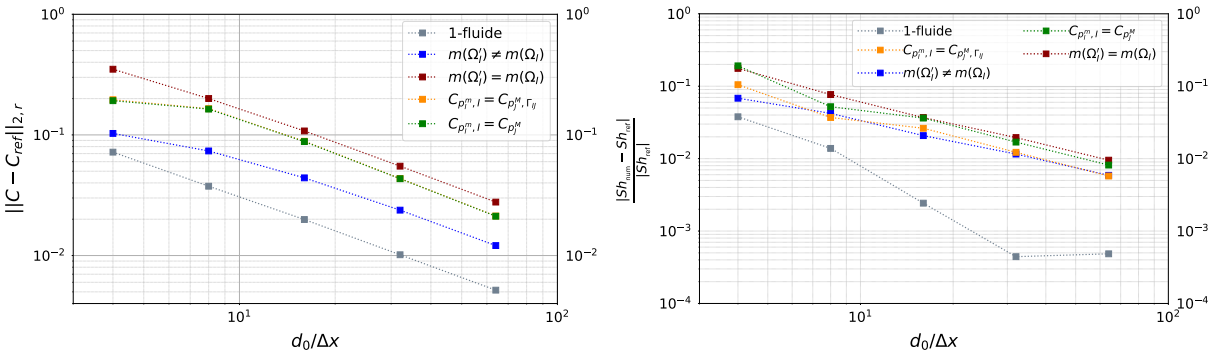



FIGURE 5.45 – Illustration de la géométrie 3D et du maillage du domaine de calcul pour une résolution $d_0/\Delta x = 8$.

**Approximation par la condition de saut :** les résultats de la première variante du schéma de transport sont présentés sur la figure 5.46, où l'on retrouve un constat similaire




(a) (b)

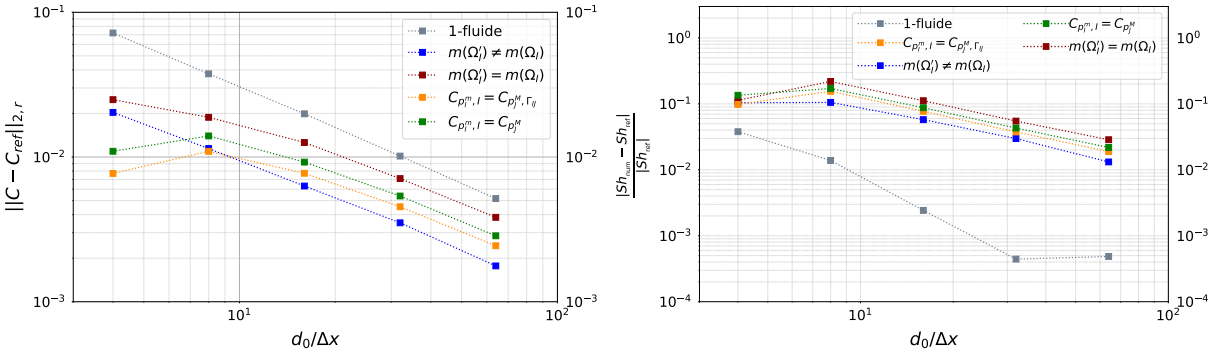
FIGURE 5.46 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert conjugué à travers une goutte en rotation.

à celui obtenu pour la bulle 2D. En effet, ce schéma de transport, dans lequel la variable de la phase minoritaire des cellules mixtes est reconstruite à partir de la relation de saut,

dégrade fortement la précision du modèle à deux champs. Celui-ci devient moins précis que le modèle à 1-fluide pour toutes les variantes du schéma temporel, la meilleure précision étant obtenue avec le schéma à volume variable $m(\Omega_I') \neq m(\Omega_I)$, qui se rapproche le plus des performances du modèle à 1-fluide. Un résultat équivalent est observé pour le nombre de Sherwood, avec les mêmes tendances.

**Approximation par une combinaison des cellules voisines :**

Comme pour le cas 2D de rotation de bulle, ce schéma de transport améliore la précision du modèle à deux champs, fournissant une solution plus précise que celle du modèle à 1-fluide, tel que présenté sur la figure 5.47. Cette amélioration est particulièrement marquée




(a) (b)

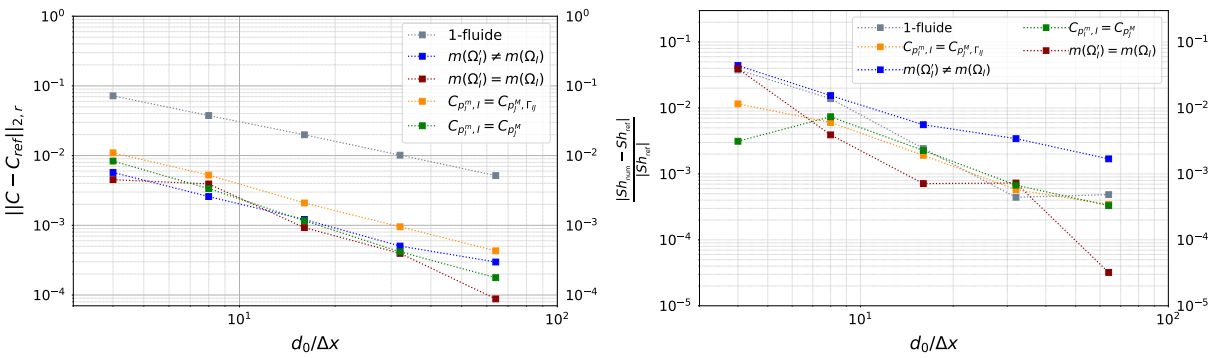
FIGURE 5.47 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert conjugué à travers une goutte en rotation.

avec le schéma temporel $m(\Omega_I') \neq m(\Omega_I)$, qui présente un niveau d'erreur au moins deux fois inférieur à celui du modèle à 1-fluide. En revanche, le gain de précision constaté sur le champ de concentration ne se traduit pas sur les résultats de convergence du nombre de Sherwood (figure de droite), où l'on observe, au contraire, une inversion de tendance au profit du modèle à 1-fluide.

**Approximation par une concentration interfaciale :**

Cette dernière version du schéma de transport s'avère la plus performante. Elle permet de préserver la précision du modèle à deux champs, avec un niveau d'erreur comparable à celui du cas statique de la bulle sur l'ensemble des maillages étudiés et pour toutes les variantes du schéma temporel. Les schémas temporels se montrent compétitifs, offrant une précision équivalente tant pour le champ de concentration que pour le nombre de Sherwood, comme l'illustre la figure 5.48.

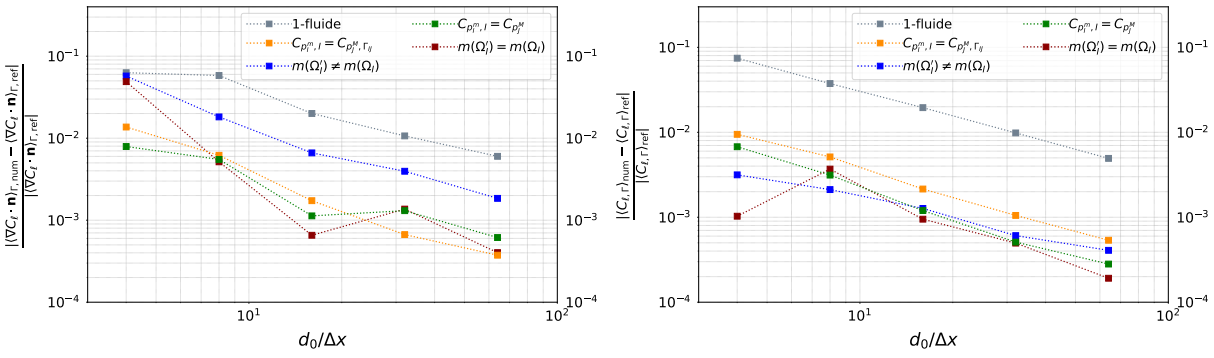
Afin d'expliquer pourquoi l'amélioration de la précision observée sur le champ de concen-




(a) (b)

FIGURE 5.48 – Effet du schéma de transport sur la précision des résultats, avec reconstruction de la phase non résolue par combinaison des concentrations interfaciales des cellules mixtes voisines : convergence du champ de concentration (a) et du nombre de Sherwood (b), pour un transfert conjugué à travers une goutte en rotation.

tration 5.48(a) ne se répercute pas systématiquement sur le nombre de Sherwood 5.48(b), une analyse séparée du numérateur et du dénominateur de son expression est réalisée, à savoir le flux diffusif et la concentration interfaciale. Les figures 5.49(a) et 5.49(b) illustrent respectivement les résultats de convergence de ces deux grandeurs. On y constate que, bien que le modèle à deux champs fournisse une meilleure précision sur chacune des grandeurs séparément. Toutefois, le rapport de ces deux quantités, constituant le nombre de Sherwood, tend à atténuer les écarts, conduisant ainsi à des niveaux de précision comparables pour les deux approches numériques. Cette analyse met en évidence un effet de compensation entre le flux de diffusion et la concentration interfaciale, expliquant la perte de l'avantage du modèle à deux champs dans l'estimation du nombre de Sherwood.




(a) (b)

FIGURE 5.49 – Résultats de convergence du flux diffusif (a) et de la concentration interfaciale (b), pour les approches numériques : à 1-fluide et à deux champs, associées aux différentes variantes de schémas temporels.

**Conclusion partielle**

Les schémas de transport présentés en section 5.3.1 sont évalués sur deux configurations : une rotation en bloc 2D et une translation d'une bulle 3D à vitesse imposée. L'analyse porte sur la précision des trois méthodes de reconstruction de la concentration dans les phases minoritaires, non résolues dans les mailles diphasiques, dont la connaissance est indispensable pour le transport VOF. Dans ce cadre, chaque phase est transportée séparément en calculant les flux entrants/sortants de chaque cellule de maillage. Les trois schémas de transport, couplés aux différentes variantes temporelles, ont été examinés pour ces deux cas.

Le principal atout de cette stratégie VOF, où chaque phase est transportée individuellement, est de supprimer les fortes fluctuations du nombre de Sherwood, en maintenant un transport synchronisé entre champ de concentration et fraction volumique.

La comparaison des trois techniques de reconstruction montre que, pour un transfert de masse externe à travers une bulle en 2D/3D, le troisième schéma : basé sur l'approximation utilisant la définition de la concentration interfaciale, et associé au schéma temporel $m(\Omega_I') \neq m(\Omega_I)$ est le plus précis. Il conserve l'avantage du modèle à deux champs et limite les erreurs de transport, offrant des résultats équivalents au cas statique (en 2D).

À l'inverse, le premier schéma, fondé sur la relation de saut de Henry, est le moins performant : les erreurs de transport dégradent la précision du modèle à deux champs, avec des écarts supérieurs à ceux du modèle à 1-fluide. Le deuxième schéma présente une précision intermédiaire. Les mêmes tendances sont observées pour le transfert interne à travers une goutte en rotation.

Enfin, pour le transfert conjugué, la hiérarchie s'inverse : le premier schéma fournit les meilleurs résultats en minimisant les erreurs de transport, suivi du troisième, tandis que le deuxième se montre le moins performant, conduisant à des erreurs supérieures à celles du modèle à 1-fluide.

## 5.4 Simulations 3D du transfert de masse à travers une bulle en ascension

Le transfert diffusif à travers des bulles ascendantes dans un liquide au repos est étudié dans cette section. Les configurations considérées correspondent aux deux conditions d'écoulement déjà examinées dans des travaux antérieurs de (Darmana, Deen et Kuipers [34], Roghair [129], Deising, Marschall et Bothe [38], Farsoiya, Popinet et Deike [46]), définies par des nombres adimensionnels : le nombre de Morton (Mo = $\frac{g\mu^4}{\rho\sigma^3}$), le nombre d'Eötvös (Eo = $\frac{\rho g d_0^2}{\sigma}$) et le nombre de Schmidt (Sc = $\frac{\rho\mu}{D}$). S'y ajoutent les rapports de densité, de viscosité dynamique, de diffusivité, ainsi qu'une constante de solubilité He, résumés dans le tableau 5.1. Ces deux configurations sont retenues pour cette analyse, car elles présentent un nombre de Reynolds plus élevé que les deux autres cas présentés dans les références précédentes, ce qui implique des couches limites dynamique et massique plus fines et concentrées au voisinage de la bulle. Cette particularité permet de réduire les exigences liées à la taille du domaine et de limiter les contraintes de maillage, tout en maintenant des coûts de calcul raisonnables.

Table 5.1 – Paramètres adimensionnels décrivant l'écoulement et le transfert de masse des configurations simulées.

| **Cas** | $\rho_l/\rho_g$ | $\mu_l/\mu_g$ | $D_l/D_g$ | $He$ | $Mo$ | $Eo$ | $Sc$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 100 | 20 | 100 | 30 | $9.2 \cdot 10^{-3}$ | 40 | 1 |
| 2 | | | | | $5 \cdot 10^{-7}$ | 3.125 | |

Le transfert de matière entre les deux phases s'effectue du gaz vers le liquide, caractérisé par des conditions initiales de concentration adimensionnelle : $C_g(t = 0, r) = C_{g,0}(r) = 1$ et $C_\ell(t = 0, r) = C_{\ell,0}(r) = 0$. Des conditions aux limites de Neumann sont imposées sur toutes les parois du domaine de calcul. Ce dernier est soigneusement choisi afin de garantir que les frontières se trouvent suffisamment loin pour simuler une condition de concentration nulle à l'infini. La résolution de la dynamique repose sur des conditions aux limites d'adhérence imposées sur toutes les parois du domaine de calcul. Dans les deux configurations étudiées, la bulle est initialement placée en $(x_0, y_0, z_0) = (2.5d_0, 2.5d_0, 2.5d_0)$ au sein d'un domaine rectangulaire de dimensions $10d_0 \times 5d_0 \times 5d_0$. Les résolutions de la grille cartésienne uniforme utilisées varient de $d_0/\Delta x = 8$ à 64. Le pas de temps est choisi de façon à respecter une condition CFL fixée à $0,3$.

L'objectif est d'évaluer la capacité du modèle développé dans ce travail à reproduire des solutions fiables. Pour ce faire, les paramètres analysés concernent à la fois :

— la dynamique de l'écoulement et la topologie de l'interface, à travers l'évaluation du

nombre de Reynolds ($\mathrm{Re} = \frac{\rho u d_0}{\mu}$),

— le transfert diffusif des espèces, caractérisé par le nombre de Sherwood ($\mathrm{Sh} = \frac{k_\ell d_0}{D}$).

Les résultats obtenus sont comparés aux corrélations disponibles dans la littérature (Clift, Grace et Weber [30], Levich [94], ainsi qu'aux travaux de référence (Roghair [129], Deising, Marschall et Bothe [38], Farsoiya, Popinet et Deike [46]) portant sur les mêmes cas tests.

Concernant la topologie d'interface, le diagramme de Grace illustré en figure 5.50, établi pour les bulles en ascension gravitationnelle dans un liquide, est utilisé comme référence de validation.

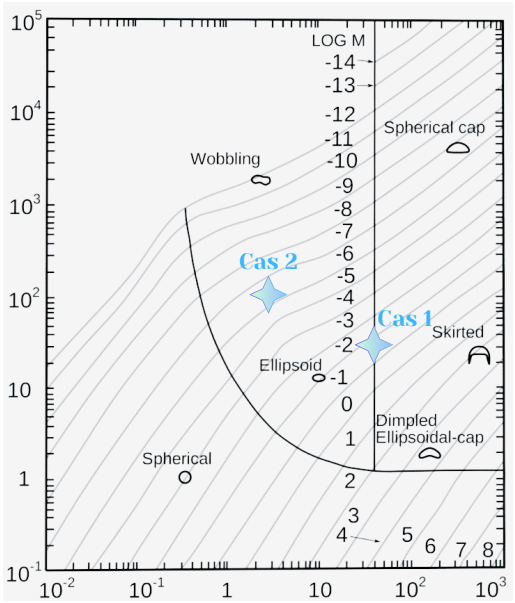
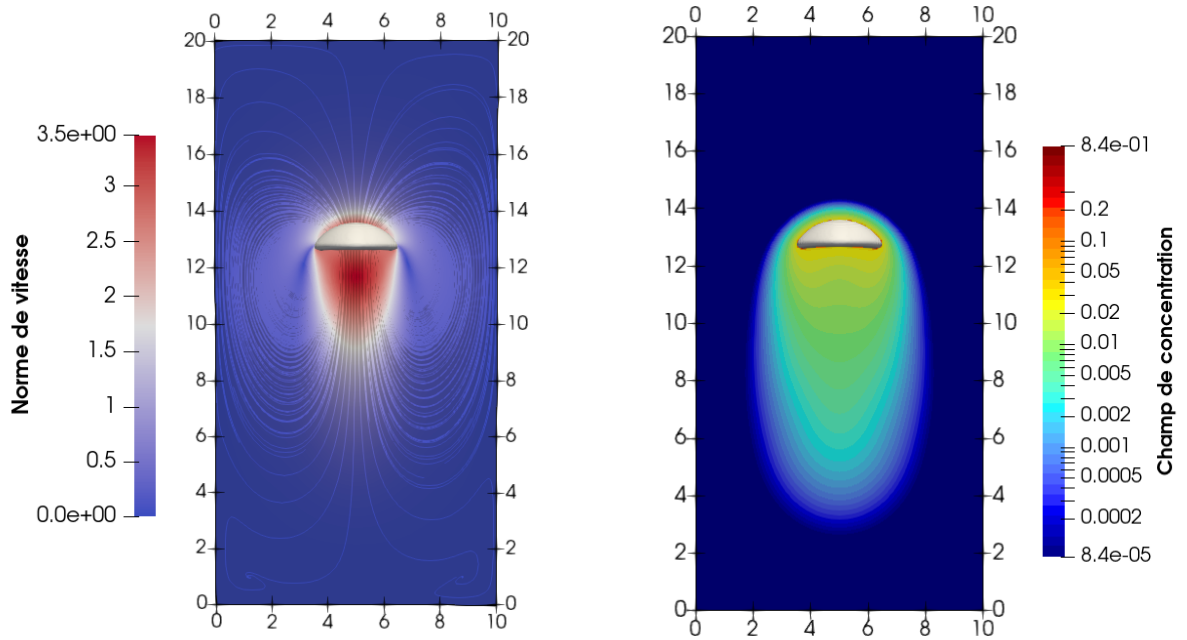



Figure 5.50 – Diagramme de Clift, Grace et Weber [30] des régimes de bulles montantes dans un liquide au repos, avec identification des cas simulés 1 et 2.

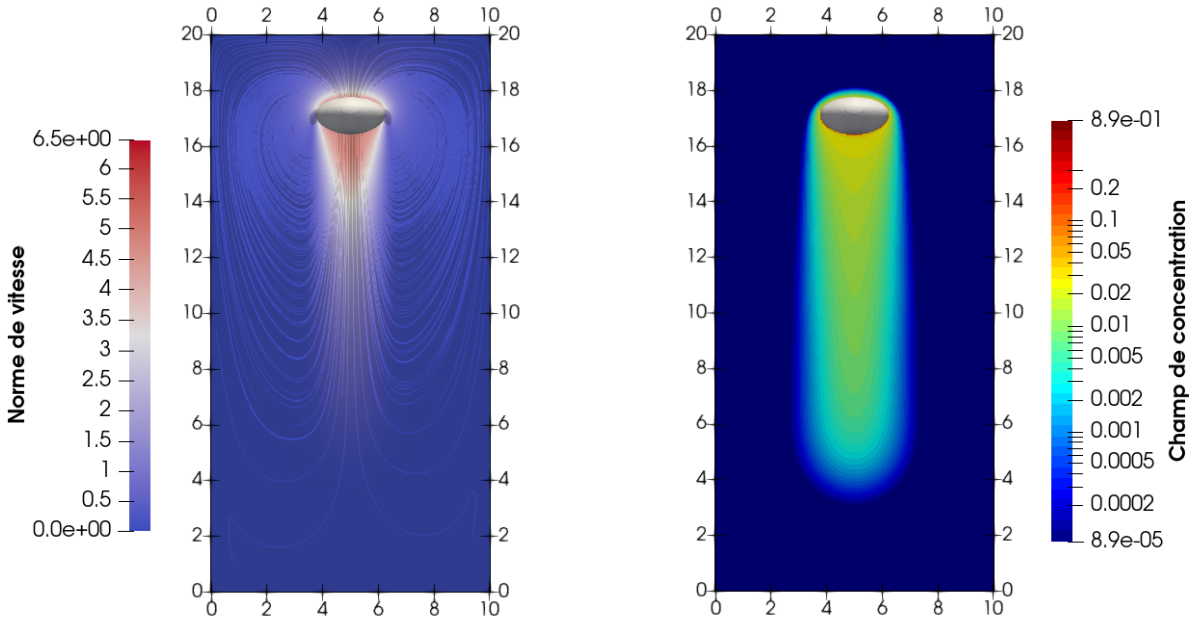
Les champs de concentration et de vitesse d'écoulement autour de la bulle, ainsi que la topologie de son interface, sont représentés sur la figure 5.51 pour le cas 1 et sur la figure 5.52 pour le cas 2.

Les figures montrent que la topologie d'interface obtenue pour chacun des cas étudiés est en parfait accord avec les prédictions du diagramme de Clift, Grace et Weber [30], ainsi qu'avec les résultats rapportés par les références numériques [34, 129, 38, 46]. Pour appuyer cette analyse qualitative, une évaluation quantitative de la qualité de la résolution de la dynamique de l'écoulement a été réalisée à travers l'estimation du nombre de Reynolds. Les résultats associés à chaque cas sont résumés dans le tableau 5.2. On y observe une bonne concordance avec les valeurs de la littérature dès la première résolution, correspondant à huit mailles par diamètre de bulle. En raffinant le maillage, une convergence vers les valeurs de référence est observée.




(a) (b)

FIGURE 5.51 – Représentation de la topologie de l'interface et du champ de vitesse (a), et la distribution logarithmique du champ de concentration (b), pour la configuration de bulle montante du cas 1.




(a) (b)

FIGURE 5.52 – Représentation de la topologie de l'interface et du champ de vitesse (a), et la distribution logarithmique du champ de concentration (b), pour la configuration de bulle montante du cas 2.

TABLE 5.2 – Comparaison des nombres de Reynolds ($Re$) de nos simulations aux références théoriques et numériques

| | | **Nombre de Reynolds** | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | **Références** | | | | | **Simulations–Fugu** | | | |
| **Cas** | **Méthode** | **[30]** | **[129]** | **[38]** | **[46]–Axi** | **[46]–3D** | $d_0/\Delta x = 8$ | 16 | 32 | 64 |
| 1 | $M1$ | 33 | 32.35 | 32.10 | 32.80 | 32.9 | 29.65 | 30.67 | 31.62 | 31.85 |
| 2 | $M1$ | 103.00 | 102.78 | 103.00 | 102.40 | 102.90 | 101.07 | 103.12 | 103.64 | 103.60 |

***Temps de simulation :*** $tD_\ell/R_0^2 \approx 0.5$ *pour le cas* 1 *et* $tD_\ell/R_0^2 \approx 0.3$ *pour le cas* 2.

**Méthodes :** $M1$ – méthode à 1-fluide.

La précision de la résolution du champ de concentration est évaluée en comparant les valeurs du nombre de Sherwood obtenues pour chaque cas avec celles des références théoriques et numériques, résumées dans le tableau 5.3. Les résultats montrent que, pour chaque cas, les solutions obtenues convergent vers les valeurs de référence, quelle que soit la méthode de résolution employée : à 1-fluide ou à deux champs. Une meilleure concordance est observée avec les résultats de la référence la plus récente de FARSOIYA, POPINET et DEIKE [46], notamment pour la configuration axisymétrique obtenue avec une résolution de 100 mailles par diamètre de bulle. Par ailleurs, nos valeurs numériques convergent plus rapidement vers cette référence, et ce dès les premiers niveaux de maillage grossiers. À l'inverse, le modèle à 1-fluide présente une convergence plus lente à niveau de raffinement égal. Ces résultats confirment que notre approche à deux champs permet une résolution précise et robuste du champ de concentration, y compris pour des niveaux de maillage relativement grossiers.

TABLE 5.3 – Comparaison des nombres de Sherwood ($Sh$) de nos simulations aux références théoriques et numériques

| | | **Nombre de Sherwood** | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | **Références** | | | | | **Simulations–Fugu** | | | |
| **Cas** | **Méthode** | **[94]** | **[129]** | **[38]** | **[46]–Axi** | **[46]–3D** | $d_0/\Delta x = 8$ | 16 | 32 | 64 |
| 1 | $M1$ | 6.4 | 6.3 | 6.4 | [4.63, 5.42] | [5.25, 6] | 6.89 | 6.19 | 5.90 | 5.65 |
| | $M2$ | | | | | | 5.17 | 5.44 | 5.39 | 5.41 |
| | $M3$ | | | | | | 5.64 | 5.38 | 5.45 | 5.37 |
| 2 | $M1$ | 11.5 | 12.03 | 11.5 | [10.52, 10.98] | [11.15, 11.33] | 20.90 | 14.29 | 13.47 | 11.97 |
| | $M2$ | | | | | | 10.34 | 10.02 | 11.04 | 11.00 |
| | $M3$ | | | | | | 10.39 | 10.30 | 11.03 | 10.84 |

***Temps de simulation :*** $tD_\ell/R_0^2 \approx 0.5$ *pour le cas* 1 *et* $tD_\ell/R_0^2 \approx 0.3$ *pour le cas* 2.

**Méthodes :** $M1$ – méthode à 1-fluide, $M2$ – méthode à deux-champs, combinée au schéma temporel standard, $M3$ – méthode à deux-champs, combinée au schéma temporel construit sur la base d'une combinaison de cellules voisines.

# Conclusion générale

Le contexte physique abordé dans cette thèse concerne le transfert de masse par diffusion à travers les interfaces entre deux fluides immiscibles en écoulement diphasique. Dans ce cadre, les composants gazeux dissous sont représentés par un champ de concentration, permettant de suivre leur transfert entre les différentes phases. Ce transfert d'espèces se rencontre principalement sous deux configurations, selon le procédé d'application considéré :

— de la phase gazeuse constituant les bulles vers le liquide environnant,
— de la phase liquide constituant les gouttelettes vers une phase continue, pouvant être soit un gaz, soit un autre liquide immiscible.

Ce travail de recherche a consisté à développer une modélisation numérique originale, adaptée à la physique discontinue intrinsèque aux transferts de masse aux interfaces des fluides immiscibles. Pour cela, nous proposons une résolution phasique à deux champs sur un maillage structuré et fixe, en résolvant une unique équation par maille. Dans les mailles diphasiques, caractérisées par la coexistence des deux phases, seule la concentration de la phase majoritaire est prise comme variable inconnue, la concentration dans la phase minoritaire doit être reconstruite. Le travail s'articule autour de trois principaux développements numériques qui portent sur la discrétisation des termes de diffusion, de transport et de la dérivée temporelle :

I. Un traitement spécifique des flux de diffusion à l'aide de la méthode Ghost-Fluid est adopté.

II. Le transport de la concentration est basé sur une approche VOF, ce qui permet une parfaite synchronisation avec le transport de l'interface. Cette modélisation requiert le transport séparé du champ de concentration dans chacune des phases, par conséquent, la connaissance de la concentration dans la phase minoritaire est nécessaire. Pour remonter à la concentration dans cette phase minoritaire des cellules mixtes, trois stratégies de reconstruction sont mises en œuvre : (i) soit étendre la relation de saut à l'ensemble de la maille, (ii) soit affecter la concentration interfaciale à la phase minoritaire de la maille, (iii) soit remplir la phase minoritaire par la concentration des cellules voisines contenant la même phase.

III. Deux classes de schémas de discrétisation temporelle, fondées sur des modélisations monophasique ou diphasique du volume de contrôle de la méthode des volumes finis, sont proposées. (i) La première consiste à choisir le volume d'intégration comme étant égal à celui de la maille. La maille diphasique est, soit considérée comme entièrement occupée par une seule phase (la phase majoritaire), soit contient les

deux phases qu'il convient alors de prendre en compte dans la discrétisation. Dans ce dernier cas, la reconstruction de la phase minoritaire s'appuie sur les mêmes stratégies que celles utilisées pour le transport. (ii) La deuxième catégorie de schémas temporels considère que le volume de contrôle n'est pas nécessairement fixe ni égal à celui de maille, mais qu'il varie de manière à ne contenir qu'une seule phase.

Après son implémentation au sein du code recherche Fugu, la robustesse, la précision et la convergence de notre méthode sont évaluées par comparaison à des solutions analytiques ou à des résultats issus de la littérature. Ces comparaisons portent sur le champ de concentration et le nombre de Sherwood. Celles-ci couvrent différentes configurations d'écoulement en 2D et en 3D : bulle et goutte statiques en diffusion pure, en rotation et en translation. Que ce soit en statique ou en dynamique, les différents modes de transfert de masse sont analysés, à savoir : le transfert intérieur, extérieur et conjugué. Nos modélisations sont comparées à l'approche à 1-fluide pour chacune des configurations. Enfin, des simulations 3D de montée de bulle dans un liquide au repos sont également réalisées.

L'analyse des résultats obtenus conduit aux principales conclusions suivantes :

- Dans le cas statique, le traitement du terme de diffusion avec l'approche Ghost-Fluid dans le cadre du modèle à deux champs proposé dans ce travail assure une meilleure qualité de solution que le modèle homogène à un fluide, avec un gain de précision d'au moins une décade.
- Un transport synchronisé entre le champ de concentration et la fraction volumique constitue une condition nécessaire pour éviter les oscillations susceptibles de parasiter la solution numérique.
- Pour le transport, l'étude comparative des approches de reconstruction de la phase minoritaire a montré que, pour les modes de transfert intérieur et extérieur, l'approche fondée sur l'utilisation de la variable d'interface est la plus pertinente. Avec cette approche, l'ajout du transport ne dégrade que très faiblement les résultats du cas statique. En revanche, pour le transfert conjugué, le remplissage par la valeur de l'interface est moins précis que l'approche basée sur la relation de saut, qui présente le niveau d'erreur le plus faible. Quant à la méthode utilisant l'information des cellules voisines, elle semble présenter peu d'intérêt lors des tests analytiques réalisés.
- Les tests de validation des schémas temporels sur des cas statiques ont montré que le schéma fondé sur un volume fixe et une modélisation diphasique, en employant la relation de saut de concentration, est le moins précis par rapport aux autres variantes. Dans le cas de la bulle et avec cette variante de schéma temporel, le modèle à deux champs devient moins précis que le modèle à un fluide. Elle a donc été

écartée pour le traitement du problème complet d'advection-diffusion. En revanche, les autres schémas se sont révélés plus performants, assurant une meilleure précision que le modèle à un fluide.

— De manière générale, pour le transfert de masse à travers l'interface des bulles et des gouttes, dans lesquelles la résistance au transfert est localisée dans une seule phase, il est montré que l'approche numérique développée dans cette thèse fournit une solution de meilleure qualité que celle du modèle homogène à un fluide. Notre modèle permet un gain de précision pouvant atteindre deux ordres de grandeur sur le champ de concentration, et un facteur allant jusqu'à 10 sur le nombre de Sherwood. Même sur des maillages grossiers, ce gain de précision atteint jusqu'à une décade, ce qui témoigne de la robustesse de notre approche numérique. Par ailleurs, dans le cas du transfert à travers une bulle, le raffinement du maillage améliore la qualité de la solution jusqu'à deux décades, indiquant une convergence d'ordre supérieur à 1, contrairement au modèle à un fluide qui converge à l'ordre 1.

— Dans le cas du transfert conjugué, où les deux phases présentent des conductivités voisines et une faible valeur de la constante de solubilité, il est montré que l'approche à un fluide et à deux champs donnent des résultats globalement équivalents. Néanmoins, le modèle à deux champs présente une précision supérieure pouvant atteindre un facteur 5 pour certaines configurations, en particulier en régime statique, ainsi qu'en transport, lorsque l'on utilise le schéma fondé sur la relation de saut combiné au schéma temporel exploitant une combinaison des cellules voisines.

— Contrairement aux nombreux travaux de la littérature qui se focalisent sur la précision du nombre de Sherwood pour qualifier la qualité de leur solution numérique, nos résultats ont montré que le nombre de Sherwood ne constitue pas un indicateur pertinent. En effet, une bonne précision obtenue pour ce paramètre n'implique pas nécessairement une solution numérique précise.

# Perspectives

Comme tout travail de recherche, celui-ci ouvre la voie à plusieurs pistes de réflexion et d'approfondissement, tant sur les aspects numériques que physiques, pouvant être envisagés dans des travaux futurs.

**À court terme :**

- Il serait intéressant de comparer les résultats issus de nos méthodes à 2 champs et 1 variable par maille pour des maillages structurés avec ceux obtenus par des approches de type cut-cell où chaque maille est purement monophasique et où les relations de continuité des flux et de saut de concentration sont exprimées à l'interface.
- Des approches couplant deux stratégies de reconstruction de la concentration dans la phase minoritaire d'une maille diphasique peuvent être envisagées afin de mieux approcher sa valeur moyenne. Une idée pourrait être de combiner une approximation définie localement à l'interface avec une approximation plus éloignée, construite avec les cellules voisines.
- Le domaine de validité de notre approche numérique peut être étendu en explorant d'autres gammes de paramètres physiques, notamment le rapport de diffusivité et le nombre de Henry.

**À long terme :**

- Dans le cadre de ce travail, la méthode Ghost-Fluid a été appliquée par direction dans une vision 1D, imposant une représentation des interfaces par des plans verticaux et/ou horizontaux selon la direction traitée. Pour mieux tenir compte de la direction de l'interface reconstruite par la méthode VOF-PLIC, une amélioration envisageable de la version actuelle pourrait consister à reformuler le flux suivant la normale à l'interface.
- La seconde piste à investiguer concerne la montée en ordre du schéma temporel global. Celui-ci est en particulier limité par le découplage des équations d'advection et de diffusion (Splitting temporel) et un schéma de transport basé sur une méthode VOF relativement standard.
- Pour l'aspect physique, les transferts de masse impliqués dans des applications réalistes sont souvent caractérisés par des nombres de Schmidt élevés (le coefficient de diffusion massique est très faible par rapport à celui de la quantité de mouvement). Cela se traduit par des couches limites massiques de plusieurs ordres de

grandeur plus fines que la couche limite dynamique, nécessitant un maillage très fin pour être correctement captées. Cette résolution n'étant pas exigée pour la résolution de la dynamique, deux options peuvent être mises en place pour pallier cette contrainte : d'une part, si une résolution est envisagée, l'idée consiste à employer deux grilles distinctes permettant de raffiner le maillage pour le transfert de masse tout en maintenant une résolution adaptée, mais plus grossière sur la grille de la dynamique. D'autre part, si une unique grille est employée, l'utilisation des modèles sous-maille représente une bonne alternative qui a déjà fait ses preuves pour assurer une bonne résolution du transfert de masse, tout en évitant d'avoir recours à un nombre excessif de mailles.

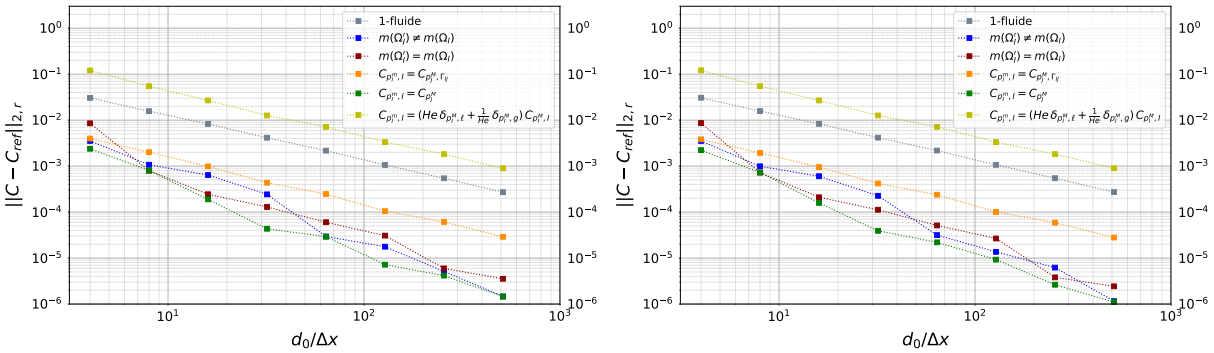
— Une fois mises en place, ces stratégies de résolution des fines couches limites massiques pourront être associées à l'approche développée dans cette thèse. Elles offriront ainsi une méthode efficace pour traiter les configurations industrielles où un grand nombre de bulles ou de gouttes coexistent et interagissent.

# Annexes

## Annexe A Résultats de la bulle statique

### A1 Effet du pas de temps sur la convergence de la solution

Les figures 5.53a et 5.53b présentent les résultats de convergence du champ de concentration numérique pour deux niveaux de raffinement temporel, correspondant respectivement aux rapports $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. Cette analyse permet d'évaluer l'influence du pas de temps sur la précision des solutions numériques et de mettre en évidence la tendance de convergence associée à chaque configuration.



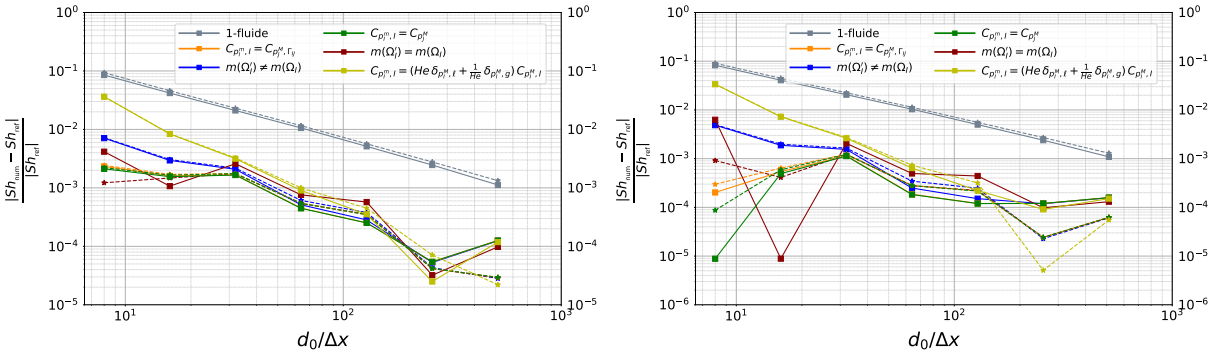

(a) (b)

FIGURE 5.53 – Étude de l'influence du pas de temps sur la convergence du champ de concentration, pour le cas de bulles statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.

### A2 Effet du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood

#### A2.1 Calcul continu du nombre de Sherwood

Les figures 5.54a et 5.54b présentent les résultats de convergence du nombre de Sherwood ($Sh_1$). Celui-ci est évalué à l'aide de la première approximation continue. L'analyse de l'influence du pas de temps sur la précision des approches numériques est réalisée en considérant deux niveaux de raffinement temporel supplémentaires par rapport à celui présenté à la page 126, correspondant aux rapports $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.

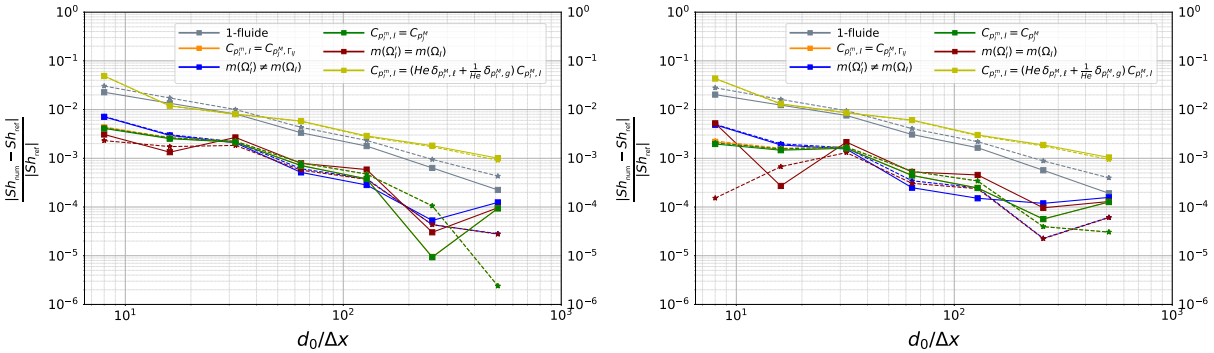



(a) (b)

FIGURE 5.54 – Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$ obtenu par une approximation continue, pour le cas de bulles statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.

### A2.2 Calcul discret du nombre de Sherwood

Comme pour la version précédente du nombre de Sherwood $Sh_1$, fondée sur l'écriture continue du flux Fickien, les figures 5.55a et 5.55b montrent l'effet du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$. Cette seconde version repose sur une approximation discrète du flux Fickien, appliquée à la partie temporelle.



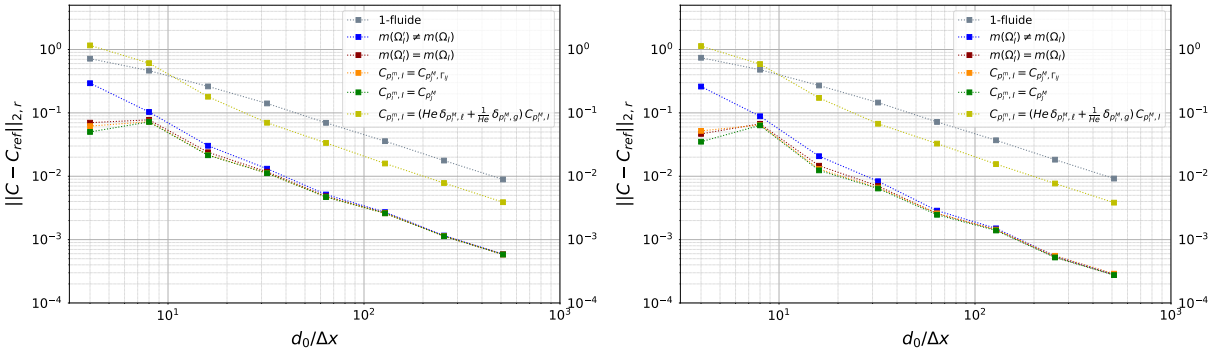

(a) (b)

FIGURE 5.55 – Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$ obtenu par une approximation discrète, pour le cas de bulles statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.

# Annexe B Résultats de la goutte statique

## B1 Effet du pas de temps sur la convergence de la solution

Comme pour le mode de transfert précédent, les figures 5.56a et 5.56b montrent l'influence du pas de temps $\Delta t$ sur la précision du champ de concentration obtenu avec les deux approches numériques, dans le cas du transfert intérieur. Deux niveaux supplémentaires de raffinement du pas de temps, par rapport à celui utilisé dans les simulations de la page 126, sont examinés. Ils correspondent aux rapports $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.




(a) (b)

FIGURE 5.56 – Étude de l'influence du pas de temps sur la convergence du champ de concentration, pour le cas de goutte statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.

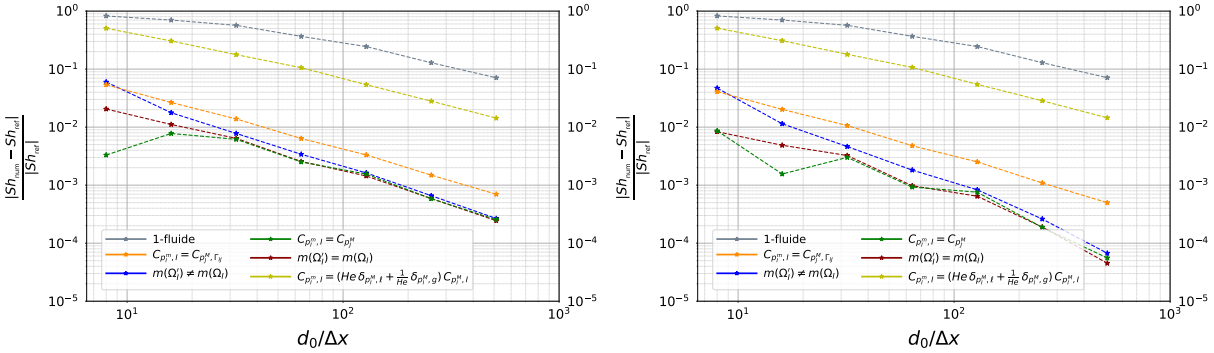
## B2 Effet du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood

### B2.1 Calcul continu du nombre de Sherwood

De manière analogue au mode de transfert précédent ($He\sqrt{D_A/D_B} \gg 1$), les figures 5.57a et 5.57b présentent la convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$ pour deux pas de temps, respectivement deux et quatre fois plus petits que celui illustré dans le corps du manuscrit de thèse, correspondant aux rapports $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.

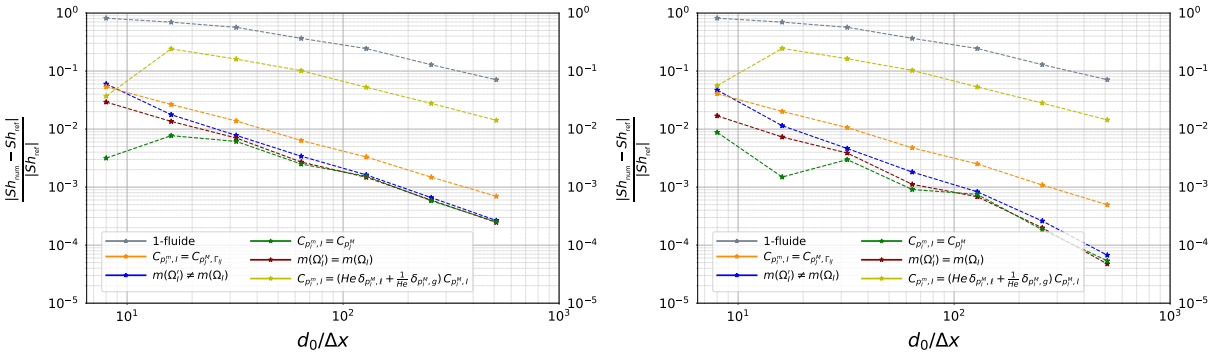
### B2.2 Calcul discret du nombre de Sherwood

Comme pour la première version du calcul du nombre de Sherwood $Sh_1$, l'influence du pas de temps de simulation sur la précision des méthodes numériques étudiées pour estimer le nombre de Sherwood $Sh_2$ est illustrée dans les figures 5.58a et 5.58b.




(a) (b)

FIGURE 5.57 – Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$ obtenu par une approximation continue, pour le cas de goutte statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.



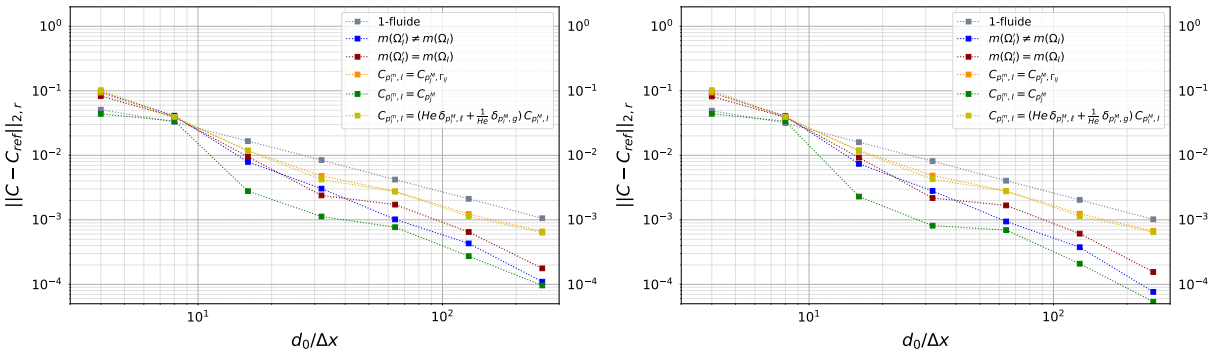

(a) (b)

FIGURE 5.58 – Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$ obtenu par une approximation discrète, pour le cas de goutte statiques : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.

# Annexe C Résultats du transfert conjugué

## C1 Effet du pas de temps sur la convergence de la solution

Les figures 5.59a et 5.59b illustrent l'évolution de l'erreur en norme $L_2$ sur le champ de concentration. Deux pas de temps supplémentaires, respectivement deux et quatre fois plus petits que le pas de temps de référence, sont considérés et correspondent aux rapports $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10, où le pas de temps est divisé par deux à chaque étape. L'objectif est d'évaluer la sensibilité des deux approches numériques (à 1 et 2 fluides) au choix du pas de temps $\Delta t$, et d'estimer l'ordre de convergence temporelle lorsqu'une dépendance est observée.




(a) (b)

FIGURE 5.59 – Étude de l'influence du pas de temps sur la convergence du champ de concentration, pour le cas de transfert conjugué : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.

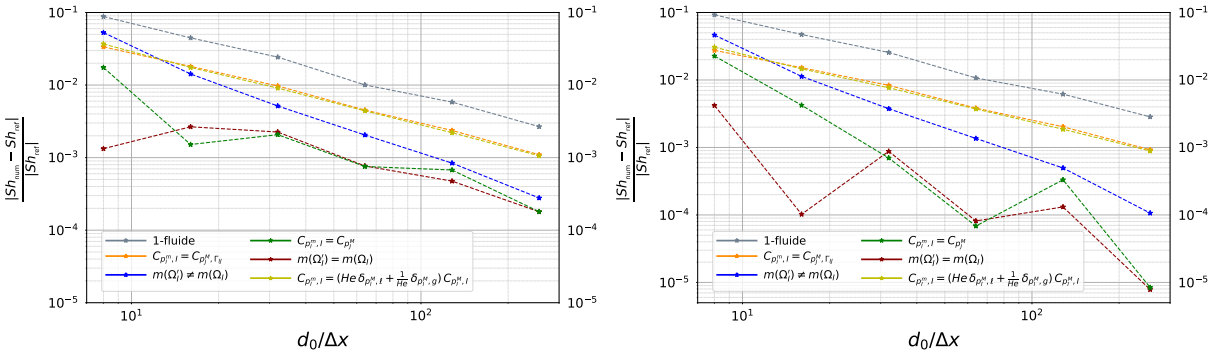
## C2 Effet du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood

### C2.1 Calcul continu du nombre de Sherwood

Afin d'analyser l'effet du pas de temps sur la convergence spatiale de la première formulation du nombre de Sherwood ($Sh_1$), deux pas de temps plus fins que le pas de temps initial correspondant à $\Delta x/\Delta t = 2.5$ sont considérés : $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10. Les résultats correspondants sont illustrés dans les figures 5.60a et 5.60b.

### C2.2 Calcul discret du nombre de Sherwood

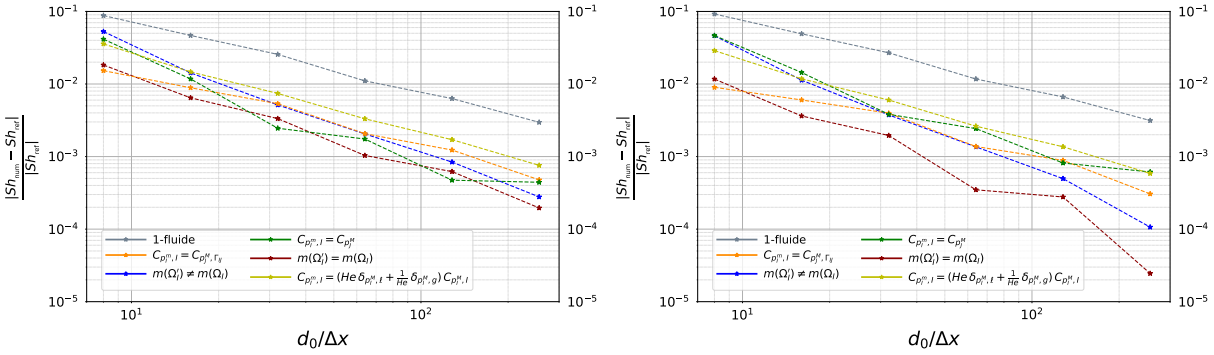
De manière analogue à la formulation précédente $Sh1$, l'influence du pas de temps sur la convergence spatiale du nombre de Sherwood $Sh2$ est étudiée en divisant $\Delta t$ par deux à chaque étape. Cette analyse permet d'évaluer la sensibilité de la précision numérique au




(a) (b)

FIGURE 5.60 – Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_1$ obtenu par une approximation continue, dans le cas du transfert conjugué : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.

raffinement temporel. Les résultats correspondants sont présentés dans les figures 5.61a et 5.61b.




(a) (b)

FIGURE 5.61 – Analyse de l'influence du pas de temps sur la convergence du nombre de Sherwood $Sh_2$ obtenu par une approximation discrète, dans le cas du transfert conjugué : (a) $\Delta x/\Delta t = 5$ , (b) $\Delta x/\Delta t = 5$ et 10.

# Annexe D Démonstration de la solution analytique

On considère une bulle statique bidimensionnelle de rayon $R_0$. Les diffusivités du gaz et du liquide sont respectivement $D_g$ et $D_l$. On suppose une invariance azimutale, de sorte que le problème est unidimensionnel et défini uniquement par la coordonnée radiale $r$. Les équations de diffusion transitoires s'écrivent :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_g}{\partial t} = D_g \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r\dfrac{\partial C_g}{\partial r}\right), & \forall r < R_0 \quad (5.79a) \\ \dfrac{\partial C_l}{\partial t} = D_l \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r\dfrac{\partial C_l}{\partial r}\right), & \forall r > R_0 \quad (5.79b) \end{cases}$$

avec

- Conditions initiales :
  - À l'intérieur de la bulle : $\forall r < R_0$, $C_g(t=0,r) = C_{g,0}$.
  - À l'extérieur de la bulle : $\forall r > R_0$, $C_l(t=0,r) = C_{l,0} = 0$.
- Conditions aux limites :
  - En $r \to \infty$ : $\forall t \geq 0$, $C_l(t,r) \to 0$.
  - En $r = R_0$ : $\forall t \geq 0$,
    - Loi de Henry (saut de concentration) :

$$C_g(t, r = R_0) = \mathrm{He}\, C_l(t, r = R_0) \quad (5.80)$$

Où $He$ est la constante adimensionnelle de la loi de Henry.

- Continuité du flux de masse :

$$D_g \left.\frac{\partial C_g}{\partial r}\right|_{r=R_0} = D_l \left.\frac{\partial C_l}{\partial r}\right|_{r=R_0} \quad (5.81)$$

La solution est abordée selon les étapes suivantes :

1. La transformée de Laplace est appliquée aux équations régissant le système.
2. Les équations transformées (équations différentielles ordinaires résultantes) sont résolues.
3. Les conditions aux limites sont appliquées dans l'espace de Laplace afin de déterminer les quatre constantes.
4. La transformée de Laplace inverse est effectuée pour obtenir des solutions dépendantes du temps dans l'espace physique.

L'application de la transformation de Laplace aux équations (5.79) conduit à :

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\bar{c}_g}{dr^2} + \dfrac{1}{r}\dfrac{d\bar{c}_g}{dr} - q_g^2(s)\bar{c}_g = -\dfrac{C_{g,0}}{D_g} & \text{(5.82a)} \\ \dfrac{d^2\bar{c}_l}{dr^2} + \dfrac{1}{r}\dfrac{d\bar{c}_l}{dr} - q_l^2(s)\bar{c}_l = 0 & \text{(5.82b)} \end{cases}$$

avec $q_l^2(s) = s/D_l$, $q_g^2(s) = s/D_g$ et $\bar{c}(s,r)$, la transformée de Laplace de $C(t,r)$, $s$ étant la variable indépendante de Laplace. Les solutions générales sont :

$$\begin{cases} \bar{c}_g(s,r) = \dfrac{C_{g,0}}{s} + A_g I_0(q_g(s)r) + B_g K_0(q_g(s)r) & \text{(5.83a)} \\ \bar{c}_l(s,r) = A_l I_0(q_l(s)r) + B_l K_0(q_l(s)r) & \text{(5.83b)} \end{cases}$$

où $I_\alpha$ et $K_\alpha$ sont respectivement les fonctions de Bessel modifiées de première et de seconde espèce. Cependant, puisque $K_0(q_g(s)r)$ est singulière en $r = 0$, on pose $B_g = 0$. De plus, lorsque $r \to \infty$, $I_0(q_l(s)r)$ diverge exponentiellement, tandis que $K_0(q_l(s)r)$ décroît exponentiellement. Par conséquent, on pose $A_l = 0$. Enfin,

$$\begin{cases} \bar{c}_g(s,r) = \dfrac{C_{g,0}}{s} + A_g I_0(q_g(s)r) & \text{(5.84a)} \\ \bar{c}_l(s,r) = B_l K_0(q_l(s)r) & \text{(5.84b)} \end{cases}$$

Dans l'espace de Laplace, les conditions aux limites à l'interface s'écrivent :

$$\begin{cases} \bar{c}_g(s,R_0) = \mathrm{He}\,\bar{c}_l(s,R_0) & \text{(5.85a)} \\ D_g \left.\dfrac{d\bar{c}_g}{dr}\right|_{r=R_0} = D_l \left.\dfrac{d\bar{c}_l}{dr}\right|_{r=R_0} & \text{(5.85b)} \end{cases}$$

L'introduction de (5.85) dans (5.84) conduit au système,

$$\begin{bmatrix} I_0(q_g(s)R_0) & -\mathrm{He}\,K_0(q_l(s)R_0) \\ D_g q_g(s) I_0'(q_g(s)R_0) & -D_l q_l(s) K_0'(q_l(s)R_0) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_g \\ B_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -C_{g,0}/s \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5.86}$$

dont la solution est,

$$A_g = \frac{D_l q_l(s) K_0'(q_l(s)R_0)\dfrac{C_{g,0}}{s}}{\Delta(s)} \quad \text{and} \quad B_l = \frac{D_g q_g(s) I_0'(q_g(s)R_0)\dfrac{C_{g,0}}{s}}{\Delta(s)} \tag{5.87}$$

avec,

$$\Delta(s) = -D_l q_l(s) I_0(q_g(s)R_0) K_0'(q_l(s)R_0) + \mathrm{He}\,D_g q_g(s) I_0'(q_g(s)R_0) K_0(q_l(s)R_0)$$

le déterminant de la matrice. Enfin, les solutions dans l'espace de Laplace s'écrivent :

$$\begin{cases} \bar{c}_g(s,r) = \dfrac{C_{g,0}}{s}\left[1 + \dfrac{D_l q_l(s) K_0'(q_l(s)R_0)}{\Delta(s)} I_0(q_g(s)r)\right] & \text{(5.88a)} \\ \bar{c}_l(s,r) = \dfrac{C_{g,0}}{s}\dfrac{D_g q_g(s) I_0'(q_g(s)R_0)}{\Delta(s)} K_0(q_l(s)r) & \text{(5.88b)} \end{cases}$$

La transformée de Laplace inverse,

$$C(r,t) = \mathcal{L}^{-1}\{\bar{c}(r,s)\} = \frac{1}{2\pi i}\lim_{\alpha\to\infty}\int_{\gamma-i\alpha}^{\gamma+i\alpha}\exp(zt)\bar{c}(r,z)dz \tag{5.89}$$

L'intégrale est calculée dans le plan complexe où $\gamma$ est un nombre réel, de sorte que le chemin d'intégration se situe dans la région de convergence de $\bar{c}(r,z)$. Cette intégrale est calculée en fermant le chemin par un contour de Bromwich et en utilisant le théorème des résidus. Comme $\Delta(z)$ n'est pas univoque autour de $z=0$, l'axe réel négatif (zéro inclus) est un point de branchement.

Le contour de Bromwich pour les points de branchement est défini comme suit. Soit $\mathcal{C}_{z,R}(\theta_1,\theta_2)$ le segment de cercle du plan complexe, centré sur le point $z \in \mathbb{I}$ et muni d'un arc angulaire reliant $Re^{i\theta_1}$ à $Re^{i\theta_2}$, et $\mathcal{S}(z_1,z_2)$ le segment orienté reliant les points $z_1$ et $z_2$, tel que $z_1 - z_2 \in \mathbb{R}$ (même partie imaginaire). En supposant que le contour de Bromwich n'entoure aucun pôle, l'intégrale le long de ce chemin s'annule. Alors, nous avons :

$$\begin{aligned} \int_{\gamma-i\alpha}^{\gamma+i\alpha}\exp(zt)\bar{c}(r,z)dz = &-\int_{\mathcal{C}_{\gamma,\alpha}(\pi/2,\pi-\varepsilon_1)}\exp(zt)\bar{c}(r,z)dz \\ &-\int_{\mathcal{S}(\gamma+\alpha e^{i(\pi-\varepsilon_1)},\beta e^{i(\pi-\varepsilon_2)})}\exp(zt)\bar{c}(r,z)dz - \int_{\mathcal{C}_{0,\beta}(\pi-\varepsilon_2,-\pi+\varepsilon_2)}\exp(zt)\bar{c}(r,z)dz \\ &-\int_{\mathcal{S}(\beta e^{-i(\pi-\varepsilon_2)},\gamma+\alpha e^{-i(\pi-\varepsilon_1)})}\exp(zt)\bar{c}(r,z)dz - \int_{\mathcal{C}_{\gamma,\alpha}(-\pi+\varepsilon_1,-\pi/2)}\exp(zt)\bar{c}(r,z)dz \end{aligned} \tag{5.90}$$

avec $\varepsilon_1 \to 0^+$ et $\sin\varepsilon_2 = \alpha/\beta \times \sin\varepsilon_1 \leq 1$ avec $\beta \to 0^+$. Par souci de concision, seule la phase gazeuse $\bar{c}_g(r,z)$ est présentée, la preuve pour la phase liquide est similaire.

— Pour prouver que les intégrales le long des chemins $\mathcal{C}_{\gamma,\alpha}(\pi/2,\pi-\varepsilon_1)$ et $\mathcal{C}_{\gamma,\alpha}(-\pi+\varepsilon_1,-\pi/2)$ tendent vers zéro avec $\alpha\to\infty$, nous utilisons le théorème suivant : Si $\|\bar{c}(r,z)\| < M/\alpha^k$ pour $z - z_0 = \alpha e^{i\theta}$, avec $M>0$ et $k>0$ deux constantes, alors

$$\lim_{\alpha\to\infty}\frac{1}{2\pi i}\int_{\mathcal{C}_{\gamma,\alpha}}\exp(zt)\bar{c}(r,z)dz = 0 \tag{5.91}$$

Les éléments de la preuve reposent sur le comportement asymptotique des fonctions

de Bessel lorsque $x \to \infty$ :

$$I_\nu(x) \approx \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}},\ K_\nu(x) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x}$$

Considérons d'abord $\Delta(z)$, le dénominateur de $\bar{c}_g(r,z)$ :

$$\begin{aligned}\Delta(z) &\approx D_l \sqrt{\frac{z}{D_l}} \frac{e^{\sqrt{\frac{z}{D_g}}R_0}}{2\sqrt[4]{\frac{zR_0^2}{D_g}}} \frac{e^{-\sqrt{\frac{z}{D_l}}R_0}}{\sqrt[4]{\frac{zR_0^2}{D_l}}} + \mathrm{He} D_g \sqrt{\frac{z}{D_g}} \frac{e^{\sqrt{\frac{z}{D_g}}R_0}}{2\sqrt[4]{\frac{zR_0^2}{D_g}}} \frac{e^{-\sqrt{\frac{z}{D_l}}R_0}}{\sqrt[4]{\frac{zR_0^2}{D_l}}} \\ &\approx \frac{\sqrt{D_l} + \mathrm{He}\sqrt{D_g}}{2R_0 \sqrt[4]{\frac{1}{D_g D_l}}} \left( e^{\sqrt{z}R_0\left(\sqrt{\frac{1}{D_g}} - \sqrt{\frac{1}{D_l}}\right)} \right)\end{aligned}$$

On obtient alors :

$$\begin{aligned}\bar{c}_g(r,z) &\approx \frac{C_{g,0}}{z} \left[ 1 - \frac{\sqrt{D_l z} \frac{e^{-\sqrt{\frac{z}{D_l}}R_0}}{2\sqrt[4]{\frac{zR_0^2}{D_l}}} \frac{e^{\sqrt{\frac{z}{D_g}}r}}{\sqrt[4]{\frac{zr^2}{D_g}}}}{\frac{\sqrt{D_l}+\mathrm{He}\sqrt{D_g}}{2R_0\sqrt[4]{\frac{1}{D_g D_l}}} \left( e^{\sqrt{z}R_0\left(\sqrt{\frac{1}{D_g}} - \sqrt{\frac{1}{D_l}}\right)} \right)} \right] \\ &\approx \frac{C_{g,0}}{z} \left[ 1 - \frac{\sqrt{D_l}\sqrt{\frac{R_0}{r}}}{\sqrt{D_l} + \mathrm{He}\sqrt{D_g}} \frac{e^{\sqrt{z}\left(-\sqrt{\frac{1}{D_l}}R_0 + \sqrt{\frac{1}{D_g}}r\right)}}{\left( e^{\sqrt{z}R_0\left(\sqrt{\frac{1}{D_g}} - \sqrt{\frac{1}{D_l}}\right)} \right)} \right] \\ &\approx \frac{C_{g,0}}{z} \left[ 1 - \frac{\sqrt{\frac{R_0}{r}}}{1 + \mathrm{He}\sqrt{\frac{D_g}{D_l}}} e^{\sqrt{z}\left(\sqrt{\frac{1}{D_g}}(r - R_0)\right)} \right]\end{aligned}$$

En remarquant que $r < R_0$ dans la bulle et $z = \alpha e^{i\theta}$, on obtient :

$$\|\bar{c}_g\| \lessapprox \frac{C_{g,0}}{\alpha} \left[ 1 + A e^{B\sqrt{\alpha}\cos(\theta/2)} \right]$$

avec $A = \sqrt{R_0/r}/(1 + \mathrm{He}\sqrt{D_g/D_l}) > 0$ et $B = (r - R_0)/\sqrt{D_g} < 0$. Le long des chemins circulaires. Pour $\mathcal{C}_{\gamma,\alpha}(\pi/2, \pi - \varepsilon_1)$ et $\mathcal{C}_{\gamma,\alpha}(-\pi + \varepsilon_1, -\pi/2)$, on a respectivement $\pi/2 \leq \theta < \pi$ et $-\pi < \theta \leq -\pi/2$. Ainsi, lorsque $\alpha$ tend vers l'infini, l'intégrale peut être majorée par une constante, ce qui permet de montrer que les deux intégrales tendent vers zéro.

— Démontrons que l'intégrale le long de $\mathcal{C}_{0,\beta}(\pi-\varepsilon_2,-\pi+\varepsilon_2)$ est nulle lorsque $\beta\to 0$. En utilisant $z=\beta e^{i\theta}$, nous avons,

$$\int_{\mathcal{C}_{0,\alpha}(-\pi+\varepsilon_1,-\pi/2)}\exp(zt)\bar{c}_g(r,z)dz=\int_{\pi-\varepsilon_2}^{-\pi+\varepsilon_2}\exp(\beta e^{i\theta}t)\bar{c}_g(r,z)\,i\beta e^{i\theta}d\theta$$

En exprimant le comportement asymptotique des fonctions de Bessel au voisinage de 0 :

$$I_\nu(x)\approx\frac{1}{\Gamma(\nu+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^\nu,\qquad K_0(x)\approx-\ln\left(\frac{x}{2}\right)-\gamma,\qquad K_\nu(x)\approx\frac{1}{2}\Gamma(\nu)\left(\frac{2}{x}\right)^\nu,\ \text{for }\nu>0$$

où $\gamma$ est la constante d'Euler-Mascheroni et $\Gamma$ la fonction d'Euler. On obtient,

$$\begin{aligned}\Delta(z)&\approx\sqrt{D_l z}\left(\frac{\sqrt{D_l}}{\sqrt{z}R_0}\right)-\mathrm{He}\sqrt{D_g z}\left(\frac{\sqrt{z}R_0}{2\sqrt{D_g}}\right)\left(\ln\left(\frac{\sqrt{z}R_0}{2\sqrt{D_l}}\right)+\gamma\right)\\&\approx\frac{D_l}{R_0}-\mathrm{He}\frac{R_0 z}{2}\left(\ln\left(\frac{\sqrt{z}R_0}{2\sqrt{D_l}}\right)+\gamma\right)\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\bar{c}(r,z)&\approx\frac{C_{g,0}}{z}\left[1-\frac{\sqrt{D_l z}\left(\frac{\sqrt{D_l}}{\sqrt{z}R_0}\right)}{\frac{D_l}{R_0}-\mathrm{He}\frac{R_0 z}{2}\left(\ln\left(\frac{\sqrt{z}R_0}{2\sqrt{D_l}}\right)+\gamma\right)}\times 1\right]\\&\approx C_{g,0}\left[\frac{-\mathrm{He}\frac{R_0}{2}\left(\ln\left(\frac{\sqrt{z}R_0}{2\sqrt{D_l}}\right)+\gamma\right)}{\frac{D_l}{R_0}-\mathrm{He}\frac{R_0 z}{2}\left(\ln\left(\frac{\sqrt{z}R_0}{2\sqrt{D_l}}\right)+\gamma\right)}\right]\end{aligned}$$

pour finalement donner : $\forall\theta\in[\pi-\varepsilon_2,-\pi+\varepsilon_2]$,

$$\exp(\beta e^{i\theta}t)\bar{c}(r,z)\,\beta e^{i\theta}\approx\exp(\beta e^{i\theta}t)C_{g,0}\left[\frac{-\mathrm{He}\frac{R_0}{2}\left(\ln\left(\frac{\sqrt{\beta}R_0e^{i\theta/2}}{2\sqrt{D_l}}\right)+\gamma\right)}{\frac{D_l}{R_0}-\mathrm{He}\frac{R_0\beta e^{i\theta}}{2}\left(\ln\left(\frac{\sqrt{\beta}R_0e^{i\theta/2}}{2\sqrt{D_l}}\right)+\gamma\right)}\right]\beta e^{i\theta}\xrightarrow{\beta\to 0}0$$

— Nous examinons maintenant les intégrations le long des segments $\mathcal{S}(\gamma+\alpha e^{i(\pi-\varepsilon_1)},\beta e^{i(\pi-\varepsilon_2)})$ et $\mathcal{S}(\beta e^{-i(\pi-\varepsilon_2)},\gamma+\alpha e^{-i(\pi-\varepsilon_1)})$, avec $\varepsilon_1\to 0$, $\varepsilon_2\to 0$. Considérons le premier chemin et définissons $z=D_g u^2 e^{i\pi}$ (avec $\sqrt{z}=i\sqrt{D_g}u$).

$$\begin{aligned}I_0&=\int_{\mathcal{S}(\gamma+\alpha e^{i(\pi-\varepsilon_1)},\beta e^{i(\pi-\varepsilon_2)})}\exp(zt)\frac{C_{g,0}}{z}\left[1+\frac{D_l q_l(z)K_0'(q_l(z)R_0)}{\Delta(z)}I_0(q_g(z)r)\right]dz\\&=-\int_{+\beta}^{-\gamma+\alpha}\exp(-D_g u^2 t)\frac{2C_{g,0}}{u}\left[1-\frac{D_l\sqrt{D_g}K_1(iuDR_0)}{\Delta(u)}I_0(iur)\right]du\end{aligned}$$

avec $D = \sqrt{D_g/D_l}$ et

$$\Delta(u) = D_l\sqrt{D_g}I_0(iuR_0)K_1(iuDR_0) + \mathrm{He}D_g\sqrt{D_l}I_1(iuR_0)K_0(iuDR_0)$$

En utilisant les relations fondamentales $I_0(ix) = J_0(x)$, $K_0(ix) = \pi(Y_0(x)+iJ_0(x))/2$, $I_1(ix) = iJ_1(x)$ et $K_1(ix) = \pi(J_1(x) - iY_1(x))/2$, on obtient,

$$I_0 = -\int_{+\beta}^{-\gamma+\alpha} \exp(-D_g u^2 t)\frac{2C_{g,0}}{u}\left[1 + \frac{D_l\sqrt{D_g}(J_1(uDR_0) - iY_1(uDR_0))}{\Psi(u) - i\Phi(u)}J_0(ur)\right]du$$

où

$$\Psi(u) = \mathrm{He}D_g\sqrt{D_l}J_1(uR_0)J_0(uDR_0) - D_l\sqrt{D_g}J_0(uR_0)J_1(uDR_0)$$
$$\Phi(u) = \mathrm{He}D_g\sqrt{D_l}J_1(uR_0)Y_0(uDR_0) - D_l\sqrt{D_g}J_0(uR_0)Y_1(uDR_0)$$

Ceci donne,

$$I_0 = -\int_{+\beta}^{-\gamma+\alpha} \exp(-D_g u^2 t)\frac{2C_{g,0}}{u(\Psi^2(u) + \Phi^2(u))}\Big[\Psi^2(u) + \Phi^2(u) + J_0(ur)\Big(D_l\sqrt{D_g}(J_1(uDR_0) - iY_1(uDR_0))\Big)(\Psi(u) + i\Phi(u))\Big]du$$

Pour le deuxième chemin $\mathcal{S}(\beta e^{-i(\pi-\varepsilon_2)}, \gamma+\alpha e^{-i(\pi-\varepsilon_1)})$, nous définissons $z = D_g u^2 e^{-i\pi}$, menant à $\sqrt{z} = -iD_g u$. Grâce aux relations $I_0(-ix) = J_0(x)$, $K_0(-ix) = \pi(iJ_0(x)-Y_0(x))/2$, $I_1(-ix) = -iJ_1(x)$ et $K_1(-ix) = -\pi(J_1(x) + iY_1(x))/2$, on obtient :

$$I_1 = \int_{+\beta}^{-\gamma+\alpha} \exp(-D_g u^2 t)\frac{2C_{g,0}}{u}\left[1 + \frac{D_l\sqrt{D_g}(J_1(uDR_0) + iY_1(uDR_0))}{\Psi(u) + i\Phi(u)}J_0(ur)\right]du$$

alors,

$$I_1 = \int_{+\beta}^{-\gamma+\alpha} \exp(-D_g u^2 t)\frac{2C_{g,0}}{u(\Psi^2(u) + \Phi^2(u))}\Big[\Psi^2(u) + \Phi^2(u) + J_0(ur)\Big(D_l\sqrt{D_g}(J_1(uDR_0) + iY_1(uDR_0))\Big)(\Psi(u) - i\Phi(u))\Big]du$$

Puisque $I_0$ et $I_1$ ont des parties imaginaires identiques, mais des composantes réelles opposées, la somme des deux intégrales donne une expression purement imaginaire :

$$I_0 + I_1 = -4\int_{+\beta}^{-\gamma+\alpha} \exp(-D_g u^2 t)C_{g,0}J_0(ur)D_l\sqrt{D_g}\frac{J_0(ur)\Big(J_1(uDR_0)\Phi(u) - Y_1(uDR_0)\Psi(u)\Big)}{u(\Psi^2(u) + \Phi^2(u))}i\ du$$

Puisque $J_1(x)Y_0(x) - J_0(x)Y_1(x) = 2/(\pi x)$ (Wronskien des fonctions de Bessel), nous trouvons :

$$I_0 + I_1 = -8 \int_{+\beta}^{-\gamma+\alpha} \exp(-D_g u^2 t) C_{g,0} D_l^2 D_g \frac{\mathrm{He} J_1(uR_0) J_0(ur)}{\pi u^2 D R_0 (\Psi^2(u) + \Phi^2(u))} i du$$

En regroupant les différentes intégrales intervenant dans l'équation de Bromwich, la transformée de Laplace inverse s'écrit :

$$\begin{aligned}
C_g(r,t) &= \frac{1}{2\pi i} \lim_{\alpha\to\infty} \int_{\gamma-i\alpha}^{\beta+i\alpha} \exp(zt) \bar{c}_g(r,z) dz \\
&= -\frac{1}{2\pi i} \lim_{\alpha\to\infty} \lim_{\beta\to 0} \left( \int_{\mathcal{S}(\gamma+\alpha e^{i(\pi-\varepsilon_1)}, \beta e^{i(\pi-\varepsilon_2)})} \exp(zt) \bar{c}_g(r,z) dz \right. \\
&\qquad \left. + \int_{\mathcal{S}(\beta e^{-i(\pi-\varepsilon_2)}, \gamma+\alpha e^{-i(\pi-\varepsilon_1)})} \exp(zt) \bar{c}_g(r,z) dz \right) \\
&= -\frac{1}{2\pi i} \lim_{\alpha\to\infty} \lim_{\beta\to 0} (I_0 + I_1) \\
&= \frac{4 C_{g,0} D_l^2 D_g \mathrm{He}}{\pi^2 D R_0} \int_0^\infty \exp(-D_g u^2 t) \frac{J_1(uR_0) J_0(ur)}{u^2 (\Psi^2(u) + \Phi^2(u))} du
\end{aligned}$$

# Annexe E Simulations 2D de bulles montantes

L'objectif de cette étude est de reproduire en 2D les configurations d'écoulement déjà considérées dans des travaux antérieurs de bulles 3D (Darmana, Deen et Kuipers [34], Roghair [129]), afin de fournir une base de résultats convergés avec une résolution spatiale atteignant $d_0/\Delta x = 256$, facilement reproductibles à des fins de validation. Les configurations considérées correspondent à trois conditions d'écoulement, définies par des nombres adimensionnels et des rapports de densité, de viscosité dynamique, de diffusivité, ainsi qu'une constante de solubilité He, résumés dans le tableau 5.4.

Table 5.4 – Paramètres adimensionnels décrivant l'écoulement et le transfert de masse des configurations simulées.

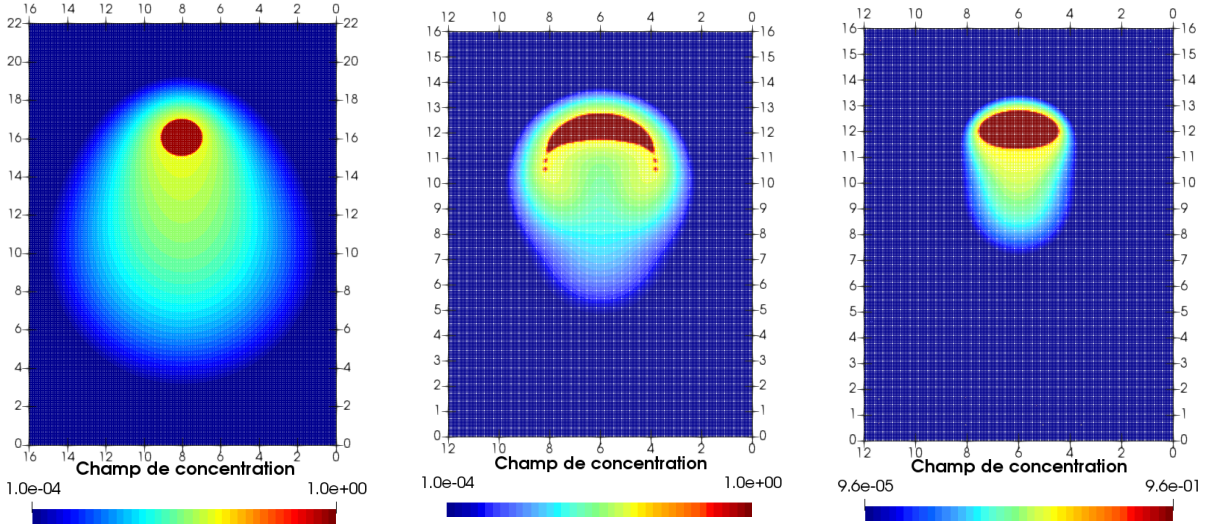
| **Cas** | $\rho_l/\rho_g$ | $\mu_l/\mu_g$ | $D_l/D_g$ | $He$ | $Mo$ | $Eo$ | $Sc$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | | | | | $10^{-4}$ | 1.0 | |
| 2 | 100 | 20 | 100 | 30 | $9.2 \cdot 10^{-3}$ | 40 | 1 |
| 3 | | | | | $5 \cdot 10^{-7}$ | 3.125 | |

Les conditions initiales de concentration adimensionnelle sont définies par $C_g(t = 0, r) = C_{g,0}(r) = 1$ et $C_\ell(t = 0, r) = C_{\ell,0}(r) = 0$. Des conditions aux limites de Neumann sont imposées sur l'ensemble des parois du domaine de calcul. Pour la résolution de l'écoulement, des conditions de glissement sont appliquées sur les parois parallèles à la direction principale du flux. Des vitesses imposées, orientées à contre-courant, sont spécifiées sur la limite supérieure du domaine, tandis qu'une condition de sortie est appliquée sur sa limite inférieure. Cette configuration permet de maintenir la bulle en position fixe, réduisant ainsi la taille du domaine nécessaire pour reproduire son ascension et autorisant un raffinement du maillage, tout en conservant des coûts de calcul raisonnables. Le domaine est choisi de sorte que les frontières demeurent suffisamment éloignées pour représenter correctement une condition de concentration nulle à l'infini. Les résolutions de la grille cartésienne uniforme utilisées varient de $d_0/\Delta x = 8$ à 256.

Pour le cas 1, la bulle est initialement placée en $(x_0, y_0) = (8d_0, 4d_0)$ dans un domaine rectangulaire de dimensions $8d_0 \times 11d_0$. Pour les deux autres configurations, elle est positionnée en $(x_0, y_0) = (6d_0, 3d_0)$ au sein d'un domaine de dimensions $6d_0 \times 8d_0$. Le pas de temps est déterminé de façon à respecter une condition CFL fixée à 0.3.

Les paramètres analysés concernent à la fois la dynamique de l'écoulement, à travers

l'évaluation du nombre de Reynolds, et le transfert diffusif des espèces, caractérisé par le nombre de Sherwood. Les résultats correspondants sont présentés dans les tableaux associés aux cas 1, 2 et 3.




cas 1 cas 2 cas 3

FIGURE 5.62 – Topologie de l'interface et distribution logarithmique du champ de concentration pour trois configurations de bulles montantes.

TABLE 5.5 – Nombres de Reynolds ($Re$) et de Sherwood ($Sh$) en fonction de la résolution spatiale pour les paramètres de simulation du cas 1.

| **Grandeur** | **Méthode** | **Résolution spatiale :** $d_0/\Delta x$ | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | 8 | 16 | 32 | 64 | 128 | 256 |
| $Re$ | M1 | 6.04 | 6.08 | 6.40 | 6.43 | 6.22 | 6.37 |
| $Sh$ | M1 | 1.91 | 1.95 | 2.07 | 2.08 | 2.01 | 2.01 |
| | M2 | 1.87 | 1.96 | 2.06 | 2.06 | 2.01 | 2.03 |
| | M3 | 1.89 | 1.96 | 2.06 | 2.06 | 2.01 | 2.03 |
| ***temps de simulation*** $tD_\ell/R_0^2 \approx 3.35$ | | | | | | | |

**Méthodes :** $M1$ – méthode à 1-fluide, $M2$ – méthode à deux-champs avec schéma temporel standard, $M3$ – méthode à deux-champs couplée à un schéma temporel reposant sur une combinaison de cellules voisines.

TABLE 5.6 – Nombres de Reynolds ($Re$) et de Sherwood ($Sh$) en fonction de la résolution spatiale pour les paramètres de simulation du cas 2.

| **Grandeur** | **Méthode** | **Résolution spatiale :** $d_0/\Delta x$ | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | | 8 | 16 | 32 | 64 | 128 |
| $Re$ | M1 | 16.89 | 20.23 | 21.07 | 22.04 | 22.13 |
| $Sh$ | M1 | 1.97 | 3.05 | 3.06 | 3.45 | 3.63 |
| | M2 | 2.43 | 3.29 | 3.25 | 3.57 | 3.63 |
| | M3 | 3.00 | 3.50 | 3.38 | 3.56 | 3.64 |
| ***temps de simulation*** $tD_\ell/R_0^2 \approx 0.52$ | | | | | | |

**Méthodes :** $M1$ – méthode à 1-fluide, $M2$ – méthode à deux-champs avec schéma temporel standard, $M3$ – méthode à deux-champs combinée à un schéma temporel reposant sur une combinaison de cellules voisines.

TABLE 5.7 – Nombres de Reynolds ($Re$) et de Sherwood ($Sh$) en fonction de la résolution spatiale pour les paramètres de simulation du cas 3.

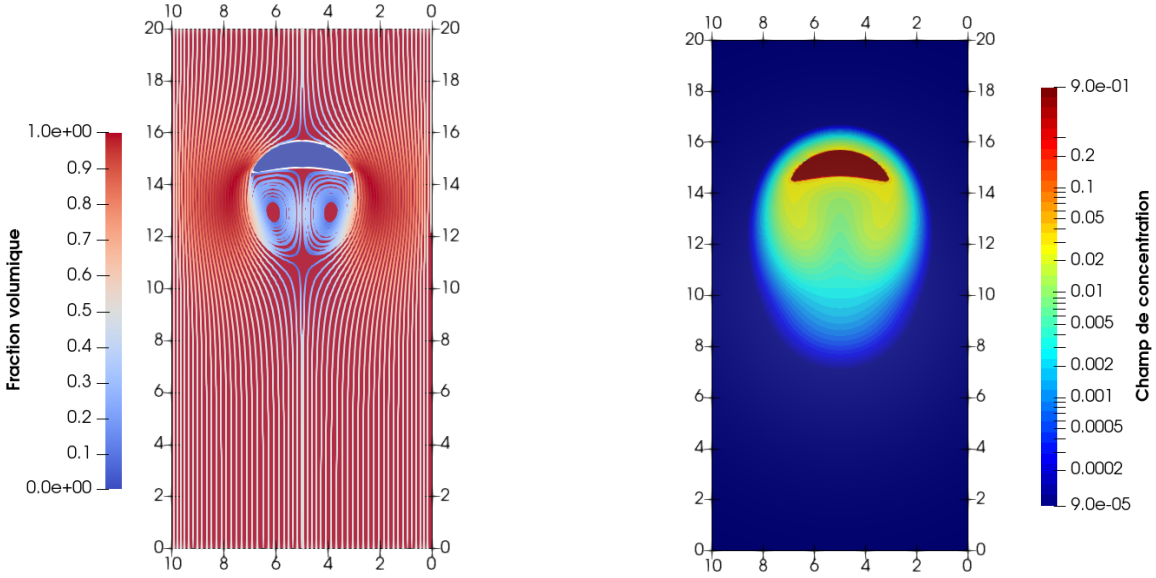
| **Grandeur** | **Méthode** | **Résolution spatiale :** $d_0/\Delta x$ | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | 8 | 16 | 32 | 64 | 128 | 256 |
| $Re$ | M1 | 60.84 | 66.73 | 64.55 | 65.42 | 63.38 | 62.47 |
| $Sh$ | M1 | 6.49 | 5.97 | 6.00 | 6.11 | 6.36 | 6.35 |
| | M2 | 6.98 | 5.56 | 5.98 | 6.19 | 6.40 | 6.34 |
| | M3 | 6.29 | 5.78 | 6.08 | 6.19 | 6.41 | 6.34 |
| ***temps de simulation*** $tD_\ell/R_0^2 \approx 0.34$ | | | | | | | |

**Méthodes :** $M1$ – méthode à 1-fluide, $M2$ – méthode à deux-champs avec schéma temporel standard, $M3$ – méthode à deux-champs combinée à un schéma temporel reposant sur une combinaison de cellules voisines.

# Annexe F — Simulations 2D de bulles montantes

La configuration de la présente simulation consiste à reproduire le cas2 de l'annexe E précédente sous deux configurations d'écoulement. (i) La première correspond à une simulation d'une bulle montante dans un repère fixe, avec des conditions de glissement imposées sur l'ensemble des parois du domaine. (ii) La seconde consiste à réaliser la simulation dans le repère mobile associé à la bulle. Des conditions d'adhérence sont alors imposées sur les parois parallèles à l'écoulement, tandis que la vitesse de montée de la bulle $U_b$, appliquée à contre-courant, est imposée sur la frontière supérieure du domaine. Une condition de sortie est enfin spécifiée sur la frontière inférieure, permettant de maintenir la bulle à une position fixe dans le domaine.

Les figures 5.63a et 5.63b illustrent respectivement le champ de l'écoulement et le champ de concentration autour de la bulle maintenue immobile dans le domaine de calcul, à l'instant final de simulation $t_f\ D_\ell/R_0^2 \approx 0.52$, et pour une résolution $d_0/\Delta x = 64$.




(a) (b)

FIGURE 5.63 – Champs de vitesse (a) et de concentration (b) autour d'une bulle montante.

L'objectif de cette étude est de vérifier l'hypothèse posée dans la section 5.2.4, page 132, stipulant que les oscillations observées sur le nombre de Sherwood sont liées au passage des cellules du maillage, d'autant plus que celles-ci augmentent avec l'augmentation de la résolution spatiale. Il a été mentionné qu'une telle situation pourrait être causée par un mauvais transport du champ de concentration par les schémas standards : (i) le schéma

Ghost-Fluid et le schéma centré pour le modèle à 2-champs, et les schémas centré et UPWIND pour le modèle 1-fluide présentés sur la figure 5.13, page 132. Pour cela, on analyse l'évolution du nombre de Sherwood au cours du temps pour les deux configurations d'écoulement de bulles montantes : en repère fixe et en repère mobile. Les résultats sont présentés sur la figure 5.64. On observe que le nombre de Sherwood présente de fortes oscillations lorsque la bulle se déplace dans le domaine (repère fixe). En revanche, lorsque la bulle est immobilisée en la maintenant à une position fixe grâce à l'injection du liquide à une vitesse adaptée à sa vitesse de montée (repère mobile), les fluctuations disparaissent presque totalement dès que le régime permanent est atteint. De légères oscillations subsistent néanmoins durant la phase transitoire, car la vitesse imposée à contre-courant n'est alors pas exactement égale à la vitesse instantanée de la bulle, celle-ci n'ayant pas encore atteint sa vitesse terminale.

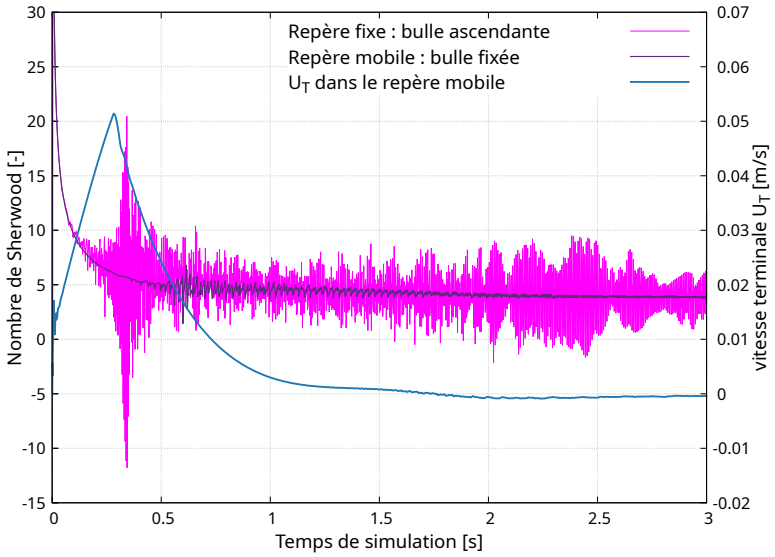
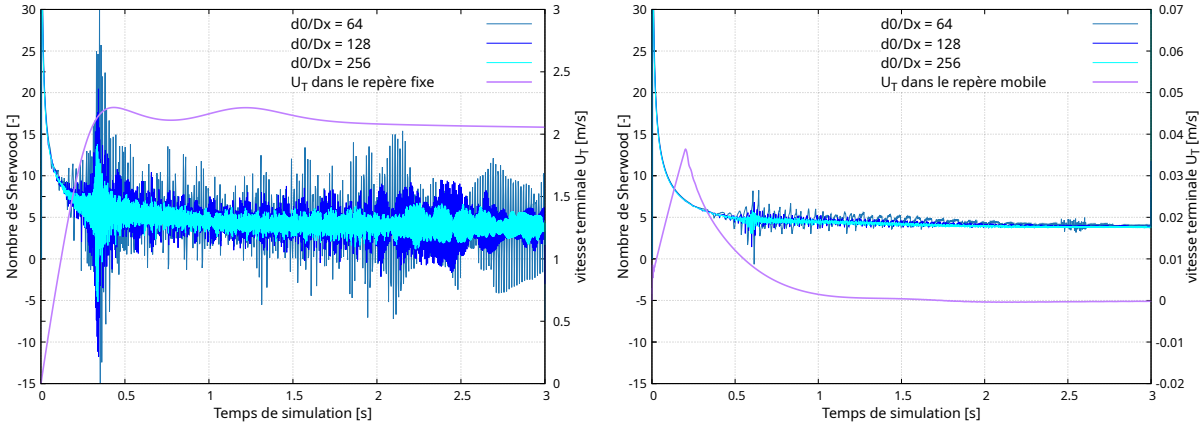



FIGURE 5.64 – Comparaison de l'évolution temporelle du nombre de Sherwood dans les deux configurations d'écoulement : bulle montante (a) et bulle immobilisée (b).

Les figures 5.65a et 5.65b présentent respectivement l'évolution temporelle du nombre de Sherwood pour trois niveaux de résolution du maillage, ainsi que la vitesse de montée de la bulle pour les deux configurations d'écoulement étudiées. Les résultats de la figure 5.65a concordent avec les observations de la section 5.2.4, à savoir que la fréquence des oscillations augmente avec la résolution du maillage, tandis que leur amplitude diminue. Sur la figure 5.65b, on observe que lorsque la bulle est maintenue immobile dans le domaine, les oscillations disparaissent, en particulier en régime permanent, où la vitesse atteint un plateau quasi nul. Cela confirme que ces oscillations proviennent d'un transport désynchronisé entre le champ de concentration et l'interface.




(a) (b)

FIGURE 5.65 – Évolution temporelle du nombre de Sherwood pour trois résolutions spatiales, dans les deux configurations d'écoulement : bulle montante (a) et bulle immobilisée (b).

# Références


[1] B. Aboulhasanzadeh et al. “Multiscale computations of mass transfer from buoyant bubbles”. In : *Chemical Engineering Science* 75 (2012).

[2] P. Angot, C.-H. Bruneau et P. Fabrie. “A Penalization Method to Take into Account Obstacles in Incompressible Viscous Flows”. In : *Numerische Mathematik* 81 (1999). doi : 10.1007/s002110050401.

[3] Jiro Aoki, Kosuke Hayashi et Akio Tomiyama. “Mass transfer from single carbon dioxide bubbles in contaminated water in a vertical pipe”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 83 (2015).

[4] A. Bandyopadhyay et M.N. Biswas. “Critical flow atomizer in SO2 spray scrubbing”. In : *Chemical Engineering Journal* 139 (2008).

[5] A. Bandyopadhyay et M.N. Biswas. “Modeling of SO2 scrubbing in spray towers”. In : *Science of the Total Environment* 383 (2007).

[6] S. Banerjee, D. S. Scott et E. Rhodes. “Mass transfer to falling wavy liquid films in turbulent flow”. In : *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 7 (1968).

[7] Yuyun Bao et al. “A review on single bubble gas–liquid mass transfer”. In : *Chinese Journal of Chemical Engineering* 28 (2020).

[8] Yuyun Bao et al. “Reactive mass transfer of single $O_2$ bubbles in a turbulent flow chamber”. In : *Chemical Engineering Science* 207 (2019).

[9] BossTek. *Demolition Dust Control Made Easy with Adamo*. 2014. url : https://bosstek.com/dust-suppression-a-key-element-of-adamo-demolition-projects/.

[10] Dieter Bothe et Stefan Fleckenstein. “A Volume-of-Fluid-based method for mass transfer processes at fluid particles”. In : *Chemical Engineering Science* 101 (2013).

[11] Emeline Bourdon et al. “Experimental and numerical investigation of gas-side mass transfer in Taylor flow”. In : *Separation and Purification Technology* 315 (2023).

[12] Y. Bozorgi et al. “Simulation of a spray scrubber performance with Eulerian/-Lagrangian approach in the aerosol removing process”. In : *Journal of Hazardous Materials* B137 (2006). doi : 10.1016/j.jhazmat.2006.02.037.

[13] J.U Brackbill, D.B Kothe et C Zemach. “A continuum method for modeling surface tension”. In : *Journal of Computational Physics* 100 (juin 1992). doi : 10.1016/0021-9991(92)90240-Y.

[14] H. Brauer. “Particle/fluid transport processes”. In : *Progress in Chemical Engineering* 17 (1979).

[15] H. Brauer. “Unsteady state mass transfer through the interface of spherical particles—i : physical and mathematical description of the mass-transfer problem”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 21 (1978).

[16] Colin Butler et al. “Numerical simulation of mass transfer dynamics in Taylor flows”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* (2021). doi : 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121670.

[17] Kangbei Cai et al. “A sub-grid scale model developed for the hexahedral grid to simulate the mass transfer between gas and liquid”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 181 (2021). doi : 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121864.

[18] P. H. Calderbank et A. C. Lochiel. “Mass transfer coefficients, velocities and shapes of carbon dioxide bubbles in free rise through distilled water”. In : *Chemical Engineering Science* 19 (1964).

[19] P. H. Calderbank et M. B. Moo-Young. “The continuous phase heat and mass-transfer properties of dispersions”. In : *Chemical Engineering Science* 16 (1961).

[20] W.H. Chen. “Air pollutant absorption by single moving droplets with drag force at moderate Reynolds numbers”. In : *Chemical Engineering Science* 61 (2006).

[21] W.H. Chen. “Atmospheric ammonia scavenging mechanisms around a liquid droplet in convective flow”. In : *Atmospheric Environment* 38 (2004).

[22] Wei-Hsin Chen, Shu-Mi Chen et Chen-I. Hung. “A theoretical approach of absorption processes of air pollutants in sprays under droplet-droplet interaction”. In : *Science of the Total Environment* 444 (2013). issn : 0048-9697. doi : 10.1016/j.scitotenv.2012.12.005.

[23] Wei-Hsin Chen, Shu-Mi Chen et Chen-I. Hung. “Carbon dioxide capture by single droplet using Selexol, Rectisol and water as absorbents : A theoretical approach”. In : *Applied Energy* 111 (2013). doi : 10.1016/j.apenergy.2013.05.051.

[24] V. Le Chenadec et H. Pitsch. “A monotonicity preserving conservative sharp interface flow solver for high density ratio two–phase flows”. In : *Journal of Computational Physics* 249 (2013).

[25] G. Cherrier et al. “Aerosol particles scavenging by a droplet : microphysical modeling in the Greenfield gap”. In : *Atmospheric Research* 166 (2017).

[26] A. Chertock, A. Kurganov et G. Petrova. “Fast explicit operator splitting method for convection–diffusion equations”. In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 59 (2009).

[27] Sanjid S. Chirammel, Atul Sharma et Janani Srree Murallidharan. “On ghost fluid method-based sharp interface level set method on a co-located grid and its comparison with balanced force-based diffuse interface method”. In : *Journal of Computational Physics* 485 (2023). doi : 10.1016/j.jcp.2023.112109.

[28] A.-J. Chorin. “Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations”. In : *Mathematics of Computation* 22.104 (1968).

[29] Claire M. Y. Claassen et al. “An improved subgrid scale model for front-tracking based simulations of mass transfer from bubbles”. In : *AIChE Journal* 66 (2020). doi : 10.1002/aic.16889.

[30] R. Clift, J. R. Grace et M. E. Weber. *Bubbles, Drops, and Particles*. New York : Academic Press, 1978.

[31] 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”. Thèse de doctorat. Toulouse, France : École Nationale Supérieure de l’Aéronautique et de l’Espace (ENSAE), 2007.

[32] P. V. Danckwerts. “Significance of liquid-film coefficients in gas absorption”. In : *Industrial & Engineering Chemistry* 43 (1951).

[33] Adil Dani et al. “Effect of spheroid bubble interface contamination on gas–liquid mass transfer at intermediate Reynolds numbers : from DNS to Sherwood numbers”. In : *Chemical Engineering Science* 248 (2022). doi : 10.1016/j.ces.2021.116979.

[34] Dadan Darmana, Niels G. Deen et J.A.M. Kuipers. “Detailed 3D Modeling of Mass Transfer Processes in Two-Phase Flows with Dynamic Interfaces”. In : *Chemical Engineering & Technology : Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology* 29 (2006).

[35] R. B. DeBar. *Eulerian hydrodynamics code for compressible nonviscous flow of several fluids in two-dimensional*. Rapp. tech. Lawrence Livermore National Laboratory, 1974.

[36] W.-D. Deckwer. “On the mechanism of mass transfer in bubble columns”. In : *Chemical Engineering Science* 35 (1980).

[37] Fred H. Deindoerfer et Arthur E. Humphrey. “Mass Transfer from Individual Gas Bubbles”. In : *Fermentation Research & Engineering* (1961).

[38] Daniel Deising, Holger Marschall et Dieter Bothe. “A unified single-field model framework for volume-of-fluid simulations of interfacial species transfer applied to bubbly flows”. In : *Chemical Engineering Science* 139 (2016).

[39] A. Dépée et al. “Laboratory study of the collection efficiency of submicron aerosol particles by cloud droplets – Part I : Influence of relative humidity”. In : *Atmospheric Chemistry and Physics* 21 (2021). doi : 10.5194/acp-21-6945-2021.

[40] O. Desjardins, V. Moureau et H. Pitsch. “An accurate conservative level set/-ghost fluid method for simulating turbulent atomization”. In : *Journal of Computational Physics* 227 (2008). doi : 10.1016/j.jcp.2008.05.027.

[41] N. Djaballah et al. “New scheme for solving mass transfer between two immiscible phases with a two-field concentration approach on Cartesian meshes : Validation in bubble cases”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* (2026). Submitted.

[42] Jack J. Dongarra et al. *Numerical Linear Algebra for High-Performance Computers*. Philadelphia : Society for Industrial et Applied Mathematics, 1998.

[43] Mohamed El Ouafa, Stephane Vincent et Vincent Le Chenadec. *Monolithic Solvers for Incompressible Two-Phase Flows at Large Density and Viscosity Ratios*. 2020. doi : 10.20944/preprints202012.0086.v1.

[44] Mohamed El Ouafa, Stéphane Vincent et Vincent Le Chenadec. “Navier-Stokes Solvers for Incompressible Single - and Two-Phase Flows”. In : *Communications in Computational Physics* 29 (2021). issn : 1991-7120, 1815-2406. doi : 10.4208/cicp.OA-2020-0044.

[45] Simon El Ouafa et al. “Développement d’un solveur tout-couplé parallèle 3D pour la simulation des écoulements diphasiques incompressibles”. In : *Proceedings du Congrès Français de Mécanique*. 2023.

[46] Palas Kumar Farsoiya, Stéphane Popinet et Luc Deike. “Bubble-mediated transfer of dilute gas in turbulence”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 920 (2021). doi : 10.1017/jfm.2021.447.

[47] Palas Kumar Farsoiya et al. “Direct numerical simulations of bubble-mediated gas transfer and dissolution in quiescent and turbulent flows”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 954 (2023). doi : 10.1017/jfm.2022.994.

[48] Yannick Fayolle. *Transfert d'oxygène en stations d'épuration à boues activées*. Master SGE – Spécialité SAGE. 2019. URL : https://hal.science/hal-04533759v1/file/Cours%20-%20Transfert%2002.pdf.

[49] Ronald P. Fedkiw, Tariq Aslam et Shaojie Xu. "The Ghost Fluid Method for Supersonic Flow with Discontinuous Equations of State". In : *Journal of Computational Physics* 152 (1999).

[50] Ronald P. Fedkiw et al. "A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method)". In : *Journal of Computational Physics* 152 (1999). DOI : 10.1006/jcph.1999.6236.

[51] Adolf Fick. "Ueber Diffusion". In : *Annalen der Physik* 170 (1855).

[52] Stefan Fleckenstein et Dieter Bothe. "A Volume-of-Fluid-based numerical method for multi-component mass transfer with local volume changes". In : *Journal of Computational Physics* 301 (2015).

[53] G. Fortescue et J. R. A. Pearson. "On gas absorption into a turbulent liquid". In : *Chemical Engineering Science* 22 (1967).

[54] J. Francois et al. "Direct measurement of mass transfer around a single bubble by micro-PLIFI". In : *Chemical Engineering Science* 66 (2011). DOI : 10.1016/j.ces.2011.01.049.

[55] N. Frössling. "Über die Verdunstung fallender Tropfen". In : *Beiträge zur Geophysik (Gerlands)* 52 (1938).

[56] Bin Fu et al. "Simulation of interfacial mass transfer process accompanied by Rayleigh convection in NaCl solution". In : *International Journal of Greenhouse Gas Control* 106 (2021). DOI : 10.1016/j.ijggc.2021.103281.

[57] X. Gamisans, M. Sarrà et F.J. Lafuente. "Gas pollutants removal in a single- and two-stage ejector–venturi scrubber". In : *Journal of Hazardous Materials* 90 (2002).

[58] Gail R. Garbarini et Chi Tien. "Mass Transfer from Single Gas Bubble - A Comparative Study on Experimental Methods". In : *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 47 (1969).

[59] Zhouyang Ge et al. "An efficient mass-preserving interface-correction level set/-ghost fluid method for droplet suspensions under depletion forces". In : *Journal of Computational Physics* 353 (2018). DOI : 10.1016/j.jcp.2017.10.046.

[60] J. Geiser et M. Elbiomy. *Splitting method of convection-diffusion methods with disentanglement methods*. Rapp. tech. Humboldt-Universität zu Berlin, Naturwissenschaftliche Fakultät II, Institut für Mathematik, 2011.

[61] Ivan Girault, Mohamed-Amine Chadil et Stéphane Vincent. “Comparison of methods computing the distance between two ellipsoids”. In : *Journal of Computational Physics* 458 (2022). doi : 10.1016/j.jcp.2022.111100.

[62] James Glimm et al. “Conservative Front Tracking with Improved Accuracy”. en. In : *SIAM Journal on Numerical Analysis* 41.5 (jan. 2003).

[63] James Glimm et al. “Three-Dimensional Front Tracking”. In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 19 (1998). issn : 1064-8275, 1095-7197. doi : 10.1137/S1064827595293600.

[64] Adrien Godé et al. “Towards more predictive correlations for conjugated mass transfer across a droplet interface”. In : *Chemical Engineering Journal* 478 (2023), p. 147110. doi : 10.1016/j.cej.2023.147110.

[65] Hadrien Godé. “Modélisation et simulation des écoulements et du transfert de matière autour d’une goutte sphérique : de l’analyse locale à de nouveaux modèles”. Thèse de doctorat. Toulouse, France : Institut National Polytechnique de Toulouse (Toulouse INP), 2023.

[66] D. Gómez-Díaz, J. M. Navaza et B. Sanjurjo. “Mass-Transfer Enhancement or Reduction by Surfactant Presence at a Gas–Liquid Interface”. In : *Industrial & Engineering Chemistry Research* 42 (2003).

[67] D. Gründing, S. Fleckenstein et D. Bothe. “A subgrid-scale model for reactive concentration boundary layers for 3D mass transfer simulations with deformable fluid interfaces”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 101 (2016). doi : 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.04.119.

[68] K. Guo et al. “Lattice Boltzmann method for conjugate heat and mass transfer with interfacial jump conditions”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 88 (2015).

[69] S. Gupta et al. “Experimental Investigations on Containment Spray Performance under Severe Accident Conditions”. In : *Proceedings of the 8th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2017)*. 2017.

[70] Francis H. Harlow et J. Eddie Welch. “Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface”. In : *The Physics of Fluids* 8 (1965). doi : 10.1063/1.1761178.

[71] Yacine Haroun, Ludovic Raynal et Dominique Legendre. “Mass transfer and liquid hold-up determination in structured packing by CFD”. In : *Chemical Engineering Science* 75 (2012).

[72] J.F. Harper. "The Motion of Bubbles and Drops Through Liquids". In : *Advances in Applied Mechanics*. T. 12. Elsevier, 1972. ISBN : 978-0-12-002012-6. DOI : 10.1016/S0065-2156(08)70133-9.

[73] R. Higbie. "The rate of absorption of pure gas into a still liquid during short periods of exposure". In : *Transactions of the American Institute of Chemical Engineers* 31 (1935).

[74] C. Hirt et B. Nichols. "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries". In : *Journal of Computational Physics* 39 (1981).

[75] G. A. Hughmark. "Holdup and Mass Transfer in Bubble Columns". In : *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development* 6 (1967). DOI : 10.1021/i260022a011.

[76] Sandro Ianniello. "GFMxP : A novel Ghost Fluid Method to solve the variable coefficient Poisson equation". In : *International Journal of Multiphase Flow* 170 (2024). DOI : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2023.104634.

[77] Sandro Ianniello. "On the boundary conditions for GFMxP high-order schemes on staggered grids in the simulation of incompressible multiphase flows". In : *International Journal of Multiphase Flow* 181 (2024). DOI : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2024.105005.

[78] Sandro Ianniello. "The GFMxP and the basic extrapolation of the ghost values to solve the Poisson equation for discontinuous functions". In : *International Journal of Multiphase Flow* 181 (2024). DOI : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2024.104997.

[79] Manish Jain et al. "Experimental investigation of CsI aerosol removal in containment spray system test facility of 700 MWe IPHWR". In : *Nuclear Engineering and Design* 390 (2022). DOI : 10.1016/j.nucengdes.2022.111715.

[80] H.W. Jia et P. Zhang. "Mass transfer of a rising spherical bubble in the contaminated solution with chemical reaction and volume change". In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* (2017). DOI : 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.02.095.

[81] Anthony C. Jones et al. "Below-cloud scavenging of aerosol by rain : a review of numerical modelling approaches and sensitivity simulations with mineral dust in the Met Office's Unified Model". In : *Atmospheric Chemistry and Physics* 22 (2022). DOI : 10.5194/acp-22-11381-2022.

[82] Chul-Ho Jung et Jung-Ho Lee. "Characteristics of particle removal by water sprays in a vertical scrubber". In : *Journal of Aerosol Science* 36 (2005).

[83] Damir Juric et Grétar Tryggvason. “Computations of boiling flows”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 24 (avr. 1998). doi : 10.1016/S0301-9322(97)00050-5.

[84] C. Kaltenbach et E. Laurien. “CFD Simulation of aerosol particle removal by water spray in the model containment THAI”. In : *Journal of Aerosol Science* 120 (2018). doi : 10.1016/j.jaerosci.2018.03.005.

[85] Myungjoo Kang, Ronald P. Fedkiw et Xu-Dong Liu. “A Boundary Condition Capturing Method for Multiphase Incompressible Flow”. In : *Journal of Scientific Computing* (2000).

[86] I. Kataoka. “Local instant formulation of two-phase flow”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 12 (1986). doi : 10.1016/0301-9322(86)90049-2.

[87] K. Kentheswaran et al. “Impact of surfactants on the dynamics of deformable bubbles”. In : *Nom du journal* (2023).

[88] Kalyani Kentheswaran et al. “Direct numerical simulation of gas-liquid mass transfer around a spherical contaminated bubble in the stagnant-cap regime”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 198 (2022). doi : 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123325.

[89] Yo Han Kim, Jongwoong Yoon et Yong Hoon Jeong. “Experimental study of the nozzle size effect on aerosol removal by pool scrubbing”. In : *Nuclear Engineering and Design* (2021).

[90] R. C. Kintner, W. F. Curtis et H. L. Toor. “Mass transfer to moving drops : drop size and velocity effects in gas absorption by falling drops”. In : *AIChE Journal* 6 (1960).

[91] G. Kong et al. “Dual emission LIF technique for pH and concentration field measurement around a rising bubble”. In : *Experimental Thermal and Fluid Science* 93 (2018). doi : 10.1016/j.expthermflusci.2017.12.032.

[92] Benjamin Lalanne, Olivier Masbernat et Frédéric Risso. “Determination of Interfacial Concentration of a Contaminated Droplet from Shape Oscillation Damping”. In : *Physical Review Letters* 124 (2020). doi : 10.1103/PhysRevLett.124.194501.

[93] M. Letzel et al. “Hydrodynamic classification of bubble column flow regimes by chaos analysis of pressure signals”. In : *Chemical Engineering Science* 54 (1999).

[94] V.G. Levich. *Physicochemical Hydrodynamics*. Prentice-Hall, 1962.

[95] W. K. Lewis et W. G. Whitman. “Principles of gas absorption”. In : *Industrial & Engineering Chemistry* 16 (1924).

[96] Chuan Li et al. “Alternating direction ghost-fluid methods for solving the heat equation with interfaces”. In : *Computers and Mathematics with Applications* 80 (2020). DOI : 10.1016/j.camwa.2020.04.027.

[97] L. Li et al. “Conjugate heat and mass transfer in the lattice Boltzmann equation method”. In : *Physical Review E* 89 (2014). DOI : 10.1103/PhysRevE.89.043308.

[98] X. Li et al. “Notable contributions of aerosols to the predictability of hail precipitation”. In : *Geophysical Research Letters* 48 (2021). DOI : 10.1029/2020GL091712.

[99] Hui Liang et al. “Numerical Simulation and Validation of Aerosol Particle Removal by Water Spray Droplets With OpenFOAM During the Fukushima Daiichi Fuel Debris Retrieval”. In : *Frontiers in Energy Research* 8 (2020). DOI : 10.3389/fenrg.2020.00102.

[100] K.S. Lim, S.H. Lee et H.S. Park. “Prediction for particle removal efficiency of a reverse jet scrubber”. In : *Journal of Aerosol Science* 37 (2006). DOI : 10.1016/j.jaerosci.2006.06.010.

[101] V. Linek, V. Vacek et P. Benes. “A critical review of correlations for mass transfer in agitated gas-liquid systems”. In : *Chemical Engineering Communications* 191 (2004).

[102] Xu-Dong Liu, Ronald P. Fedkiw et Myungjoo Kang. “A Boundary Condition Capturing Method for Poisson’s Equation on Irregular Domains”. In : *Journal of Computational Physics* 160 (2000). DOI : 10.1006/jcph.2000.6444.

[103] A. C. Lochiel et P. H. Calderbank. “Mass transfer in the continuous phase around axisymmetric bodies of revolution”. In : *Chemical Engineering Science* 19 (1964).

[104] J.H. Lu, H.Y. Lei et C.S. Dai. “Analysis of Henry’s law and a unified lattice Boltzmann equation for conjugate mass transfer problem”. In : *Chemical Engineering Science* 199 (2019).

[105] J.H. Lu, H.Y. Lei et C.S. Dai. “Lattice Boltzmann equation for mass transfer in multi-solvent systems”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 132 (2019).

[106] Jacob Maarek. “Mass Transfer at Fluid Interfaces at Large Péclet Numbers”. Spécialité : Sciences de l’ingénieur. PhD thesis. Sorbonne Université, 2024.

[107] J. Maes et C. Soulaine. “A unified single-field Volume-of-Fluid-based formulation for multi-component interfacial transfer with local volume changes”. In : *Journal of Computational Physics* 402 (2020).

[108] J. Magnaudet. “Méthodes numériques pour les problèmes d’interfaces”. In : *École de printemps, Lalonde des Maures*. Toulouse, France : Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, UMR 5502, 1997.

[109] M. J. Marcos et al. *LACE-España experimental programme on the retention of aerosols in water pools*. Rapp. tech. Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT), 1994.

[110] M. J. McCready, E. Vassiliadou et T. J. Hanratty. “Computer simulation of turbulent mass transfer at a mobile interface”. In : *AIChE Journal* 32 (1986).

[111] Midwest Industrial Supply, Inc. *Dust-Buster Sprayer Systems – Product Overview*. 2025. URL : https://www.midwestind.com/product-overview/dust-buster-sprayer-systems.

[112] F. J. Montes, M. A. Galan et R. L. Cerro. “Mass transfer from oscillating bubbles in bioreactors”. In : *Chemical Engineering Science* 54 (1999).

[113] B. M. Ningegowda et al. “A mass-preserving interface-correction level set/-ghost fluid method for modeling of three-dimensional boiling flows”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 162 (2020). DOI : 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120382.

[114] W. F. Noh et Paul Woodward. “SLIC (Simple Line Interface Calculation)”. In : *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28 – July 2, 1976 Twente University, Enschede*. Sous la dir. de J. Ehlers et al. T. 59. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1976. DOI : 10.1007/3-540-08004-X_336.

[115] E. Olsson et G. Kreiss. “A conservative level set method for two phase flow”. In : *Journal of Computational Physics* 210 (nov. 2005).

[116] Stanley Osher et James A Sethian. “Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations”. In : *Journal of Computational Physics* 79 (1988). DOI : 10.1016/0021-9991(88)90002-2.

[117] J. E. Pilliod et E. G. Puckett. “Second-Order Accurate Volume-of-Fluid Algorithms for Tracking Material Interfaces”. In : *Journal of Computational Physics* 199 (2004).

[118] E. Porcheron, P. Lemaitre et D. Marchand. “Aerosol Removal by Emergency Spray in PWR Containment”. In : *Journal of Energy and Power Engineering* 5 (2011).

[119] E. Porcheron et al. “Experimental and numerical approaches of aerosol removal in spray conditions for containment application”. In : *Nuclear Engineering and Design* 240 (2010).

[120] E. Porcheron et al. “Heat mass and aerosol transfer in spray conditions for containment applications”. In : *Journal of Power and Energy Systems* 2 (2008).

[121] Emmanuel Porcheron, Pascal Lemaitre et Denis Marchand. “Aerosol removal by emergency spray in PWR containment”. In : *Journal of Energy and Power Engineering* 5 (2011). url : https://www.researchgate.net/publication/288462075.

[122] E. G. Puckett. “A volume-of-fluid interface reconstruction algorithm that is second-order accurate in the max norm”. In : *Communications in Applied Mathematics and Computational Science* 5 (2010).

[123] Arnaud Quérel et al. “An experiment to measure raindrop collection efficiencies : influence of rear capture”. In : *Atmospheric Measurement Techniques Discussions* 7 (2014).

[124] Azeddine Rachih et al. “Numerical study of conjugate mass transfer from a spherical droplet at moderate Reynolds number”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 157 (2020). issn : 0017-9310. doi : 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.119958.

[125] Azzedine Rachih. “Étude numérique du transfert de matière à travers l’interface d’une goutte sphérique en mouvement : mise en évidence des effets 3D”. Thèse de doctorat. Toulouse, France : Institut National Polytechnique de Toulouse (Toulouse INP), 2019.

[126] W. E. Ranz et W. R. Marshall. “Evaporation from drops”. In : *Chemical Engineering Progress* 48 (1952).

[127] R. D. Richtmyer et K. W. Morton. *Difference Methods for Initial Value Problems*. New York : Interscience Publishers, 1967.

[128] William J. Rider et Douglas B. Kothe. “Reconstructing Volume Tracking”. In : *Journal of Computational Physics* 141 (1998). doi : 10.1006/jcph.1998.5906.

[129] I. Roghair. “Direct Numerical Simulations of Hydrodynamics and Mass Transfer in Dense Bubbly Flows”. PhD thesis. University of Twente, 2012.

[130] Michel Roustan. *Transferts gaz-liquide dans les procédés de traitement des eaux et des effluents gazeux*. Paris : Tec & Doc, 2003.

[131] S. Roy et S. R. Duke. “Visualization of oxygen concentration fields and measurement of concentration gradients at bubble surfaces in surfactant-contaminated water”. In : *Experiments in Fluids* 36 (2004).

[132] Takayuki Saito et Masahiko Toriu. “Effects of a bubble and the surrounding liquid motions on the instantaneous mass transfer across the gas–liquid interface”. In : *Chemical Engineering Journal* 265 (2015). doi : 10.1016/j.cej.2014.12.039.

[133] Rolf Sander. “Compilation of Henry’s law constants (version 4.0) for water as solvent”. In : *Atmospheric Chemistry and Physics* 15 (2015). doi : 10.5194/acp-15-4399-2015.

[134] Rolf Sander. “Compilation of Henry’s law constants (version 5.0.0) for water as solvent”. In : *Atmospheric Chemistry and Physics* 23 (2023). doi : 10.5194/acp-23-10901-2023.

[135] Rolf Sander et al. “Henry’s law constants (IUPAC Recommendations 2021)”. In : *Pure and Applied Chemistry* 94 (2022). doi : 10.1515/pac-2020-0302.

[136] Rodolphe Sardeing, Pisut Painmanakul et Gilles Hébrard. “Effect of surfactants on liquid-side mass transfer coefficients in gas–liquid systems : A first step to modeling”. In : *Chemical Engineering Science* 61 (2006).

[137] S. S. Savekina et Yu. B. Shmel’kova. “Simulation of Aerosol Removal from the Atmosphere of an NPP Containment using a Sprinkler System”. In : *National Research Center Kurchatov Institute* (2021). Received May 26, revised June 21, accepted June 23.

[138] Javed Shaikh, Rajneesh Bhardwaj et Atul Sharma. “A Ghost Fluid Method Based Sharp Interface Level Set Method for Evaporating Droplet”. In : *Procedia IUTAM*. T. 15. Elsevier, 2015. doi : 10.1016/j.piutam.2015.04.018.

[139] Changxiao Shao, Shian Yuan et Kun Luo. “A generalized coupled level set/volume-of-fluid/ghost fluid method for detailed simulation of gas-liquid flows”. In : *Journal of Computational Physics* 487 (2023). doi : 10.1016/j.jcp.2023.112158.

[140] M. Elouafa Simon. “Développement d’un solveur tout-couplé parallèle 3D pour la simulation des écoulements diphasiques incompressibles à forts rapports de viscosités et de masses volumiques”. Thèse de doctorat. Université Gustave Eiffel, 2022.

[141] A. H. P. Skelland et L. T. Moeti. “Mechanism of mass transfer from oscillating drops in liquid-liquid systems”. In : *Industrial & Engineering Chemistry Research* 29 (1990).

[142] M. Sow et P. Lemaitre. “Influence of electric charges on the washout efficiency of atmospheric aerosols by raindrops”. In : *Annals of Nuclear Energy* 93 (2016). doi : 10.1016/j.anucene.2015.12.036.

[143] StockCake. *Elegant Water Splash*. 2025. url : https://stockcake.com/i/elegant-water-splash_1480883_1161033.

[144] G. Strang. “On the construction and comparison of difference schemes”. In : *SIAM Journal on Numerical Analysis* 5.3 (1968).

[145] Sulfur Recovery Engineering, Inc. *The Amine Sweetening Process*. https://www.sulfurrecovery.com/amine-the-process. 2025.

[146] Haomin Sun et al. “Experimental and analytical investigations on aerosol washout in a large vessel with high spray coverage ratio simulating PWR containment spray”. In : *Journal of Nuclear Science and Technology* (2022). doi : 10.1080/00223131.2022.2055673.

[147] Haomin Sun et al. “Experimental investigation of decontamination factor dependence on aerosol concentration in pool scrubbing”. In : *Science and Technology of Nuclear Installations* 2019 (2019).

[148] M. Sussman, P. Smereka et S. Osher. “A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flows”. In : *Journal of Computational Physics* 114 (1994).

[149] M. Sussman et al. “An improved level set method for incompressible two-phase flows”. In : *Computers & Fluids* 27 (1998).

[150] Mark Sussman et Elbridge Gerry Puckett. “A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3D and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows”. In : *Journal of Computational Physics* 162 (2000). doi : 10.1006/jcph.2000.6537.

[151] F. Takemura et A. Yabe. “Gas dissolution process of spherical rising gas bubbles”. In : *Chemical Engineering Science* 53 (1998).

[152] Fumio Takemura et Yoichiro Matsumoto. “Dissolution rate of spherical carbon dioxide bubbles in strong alkaline solutions”. In : *Chemical Engineering Science* 55 (2000).

[153] Zhikai Tan et al. “Investigation on interphase mass transfer coefficient of a deformable bubble with density contrast using phase-field lattice Boltzmann method”. In : *Chemical Engineering Science* 283 (2024). doi : 10.1016/j.ces.2023.119443.

[154] Zhikai Tan et al. “Investigation on interphase mass transfer coefficient of a deformable bubble with density contrast using phase-field lattice Boltzmann method”. In : *Chemical Engineering Science* 283 (2024). doi : 10.1016/j.ces.2023.119443.

[155] Sébastien Tanguy et al. “Benchmarks and numerical methods for the simulation of boiling flows”. In : *Journal of Computational Physics* 264 (2014).

[156] R. Témam. “Sur l’approximation de la solution des équations de Navier-Stokes par la méthode des pas fractionnaires (I)”. In : *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 32 (1969).

[157] T. G. Theofanous, R. N. Houze et L. H. Brumfield. “Turbulent mass transfer at free, gas-liquid interfaces, with applications to open-channel, bubble and jet flows”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 19 (1976).

[158] Alexis Tourbier. “Numerical simulation of reactive Taylor flows”. Spécialité : Génie des procédés. PhD thesis. Institut National Polytechnique de Toulouse – INPT, 2023.

[159] Grétar Tryggvason, Ruben Scardovelli et Stéphane Zaleski. *Direct Numerical Simulations of Gas–Liquid Multiphase Flows*. Cambridge University Press, 2011. doi : 10.1017/CBO9780511975264.

[160] Marco Turni. “Experimental Study and Modeling of a Pool Scrubbing System for Aerosol Removal”. PhD Thesis. Politecnico di Milano, 2016.

[161] UnaEnergia. *Onda - Una Energia*. 2025. url : https://unaenergia.com/onda/.

[162] Salih Ozen Unverdi et Grétar Tryggvason. “A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows”. In : *Journal of Computational Physics* 100 (mai 1992). issn : 00219991. doi : 10.1016/0021-9991(92)90307-K.

[163] Pierre Valiorgue et al. “Concentration measurement in the wake of a free rising bubble using planar laser-induced fluorescence (PLIF) with a calibration taking into account fluorescence extinction variations”. In : *Experiments in Fluids* 54 (2013). doi : 10.1007/s00348-013-1501-y.

[164] Jorge M. T. Vasconcelos, Sandra P. Orvalho et Sebastião S. Alves. “Gas–Liquid Mass Transfer to Single Bubbles : Effect of Surface Contamination”. In : *AIChE Journal* 48 (2002).

[165] Stéphane Vincent. “Modélisation d’écoulements incompressibles de fluides non-miscibles”. 336 pages. Thèse de doctorat en mécanique. Université Bordeaux I, 1999. url : https://www.theses.fr/1999BOR10648.

[166] P. M. Wanek et M. P. Duduković. “Mass transfer in bubble columns : A scale-up study”. In : *AIChE Journal* 36 (1990).

[167] Ao Wang, Qiang Song et Qiang Yao. “Study on inertial capture of particles by a droplet in a wide Reynolds number range”. In : *Journal of Aerosol Science* 93 (2016). doi : 10.1016/j.jaerosci.2015.11.010.

[168] Jun Wang et al. “Dynamically measuring unstable reaction–diffusion process by using digital holographic interferometry”. en. In : *Optics and Lasers in Engineering* 57 (2014). doi : 10.1016/j.optlaseng.2014.01.004.

[169] Andre Weiner et Dieter Bothe. “Advanced subgrid-scale modeling for convection-dominated species transport at fluid interfaces with application to mass transfer from rising bubbles”. In : *Journal of Computational Physics* 347 (2017).

[170] Andre Weiner et al. “Assessment of a subgrid-scale model for convection-dominated mass transfer for initial transient rise of a bubble”. In : *AIChE Journal* 68 (2022). doi : 10.1002/aic.17641.

[171] J. Weisman et S. Y. Kang. “Flow pattern transitions in vertical and upwardly inclined lines”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 7 (1981). doi : 10.1016/0301-9322(81)90022-7.

[172] G. Weymouth et D. K. P. Yue. “Conservative volume-of-fluid method for free-surface simulations on cartesian-grids”. In : *Journal of Computational Physics* 229 (2010). doi : 10.1016/j.jcp.2009.12.018.

[173] Izabela Wysocka, Jacek Gębicki et Jacek Namieśnik. “Technologies for deodorization of malodorous gases”. In : *Environmental Science and Pollution Research* 26 (2019). doi : 10.1007/s11356-019-04195-1.

[174] D. Youngs. “Time-Dependent Multi-material Flow with Large Fluid Distortion”. In : *Numerical Methods for Fluid Dynamics*. T. 24. 1982.

[175] Longyun Zheng et al. “Investigation of mass transfer model of $CO_2$ absorption with Rayleigh convection using multi-relaxation time lattice Boltzmann method”. In : *Chinese Journal of Chemical Engineering* 50 (2022). doi : 10.1016/j.cjche.2022.07.003.

[176] C. Zhu. “Study on Flow Field and Concentration Porfile around Bubbles in Non-Newtonian Fluid”. PhD Thesis. Tianjin University : PhD Thesis, 2010.