

Deuxième partie

Évaluation du FEMM sur des configurations simples

Introduction

L'objectif de cette partie est de réaliser une première évaluation du FEMM, et des méthodologies numériques qui lui sont associées dans AVBP .

Les méthodologies numériques disponibles dans AVBP pour la phase liquide sont présentées. Ces stratégies sont celles utilisées pour la phase gazeuse, mais ont été adaptées à la phase liquide par [Riber \[2007\]](#) et [Martinez \[2010\]](#) notamment. Une évaluation est proposée sur des cas tests simples de convection monodimensionnels.

Les deux composantes du FEMM sont ensuite évaluées séparément : la modélisation FEM pour reproduire la dynamique des écoulements turbulents , et l'approche multi-fluide qui agit sur la répartition et l'évaporation des gouttes. La modélisation FEM est évaluée sur un cas test de Turbulence Homogène Isotrope chargée en particules.

La prise en compte de la polydispersion est quant à elle évaluée sur le jet en écoulement transverse, dont la dynamique est fortement conditionnée par le nombre de Stokes des gouttes constituant le jet, et sur des cas tests d'évaporation 0D, permettant de mettre en évidence les caractéristiques physiques et numériques de la prise en compte de l'évaporation par l'approche multi-fluide.



Chapitre 3

Évaluation des stratégies numériques pour le calcul diphasique

3.1 Le code AVBP

AVBP est un code de calcul développé conjointement par le CERFACS¹ et IFP énergies nouvelles². Ce code a été développé dans le but de disposer d'un solveur LES parallèle haute performance pour le calcul de géométries industrielles. Il est capable de résoudre les équations de Navier-Stokes sur des maillages non-structurés et hybrides et donc de simuler des écoulements complexes dans des géométries réelles. Destiné tout d'abord aux écoulements externes stationnaires non-réactifs, il a évolué pour répondre aux besoins accrus de simulation d'écoulements internes instationnaires diphasiques réactifs. Une évaluation détaillée des méthodes numériques utilisées dans AVBP ainsi que leur intérêt dans une approche LES sont proposés par Lamarque [2007].

L'intégration temporelle est explicite pour tous les schémas numériques d'AVBP. Tous les schémas convectifs ont une condition de stabilité de type Courant-Friedrichs-Levy (CFL) basée sur les ondes les plus rapides de l'écoulement, c'est-à-dire acoustiques en compressible :

$$\Delta t < \text{CFL} \frac{\min(\Delta x)}{\max |\mathbf{u}| + c} \quad (3.1)$$

où c est la vitesse du son. La valeur du CFL maximum dépend du type de schéma utilisé. Une limite sur les pas de temps chimique et diffusif est également introduite dans le cas de simulations réactives multi-espèces.

Pour l'intégration des termes spatiaux, la méthode *cell-vertex* est utilisée. Elle consiste à stocker les variables conservatives aux nœuds et à résoudre les équations de conservation à la cellule de maillage. L'intérêt de cette méthode est une compacité maximale et une écriture facilement parallélisable.

1. Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée au Calcul Scientifique - www.cerfacs.fr

2. www.ifpenergiesnouvelles.fr

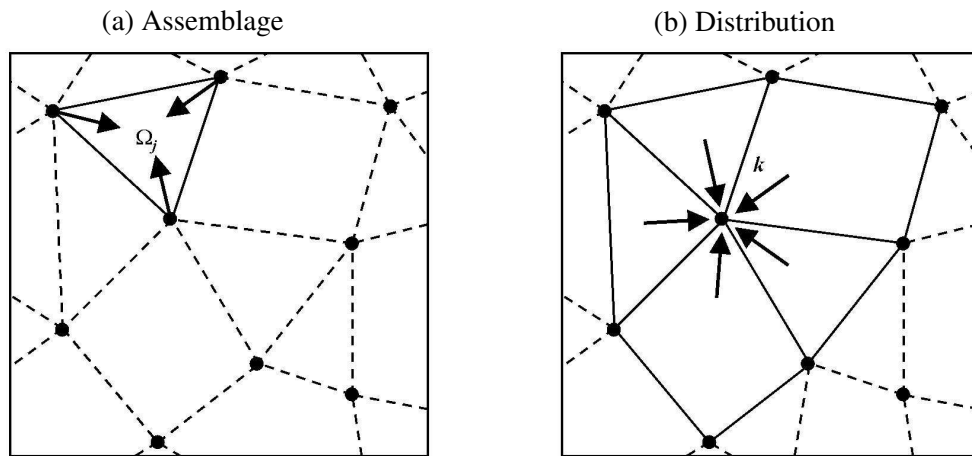


FIGURE 3.1 – Principe de la méthode cell-vertex, en deux étapes : assemblage et distribution. D’après Moureau [2004] .

Cette méthode consiste en deux étapes illustrées par la figure (3.1) :

- assemblage (ou gather) : les variables conservatives stockées aux nœuds sont stockées à la cellule en utilisant la connectivité cellule-nœuds.
- distribution (ou scatter) : les résidus calculés sur le volume de contrôle de la cellule sont redistribués aux volumes de contrôle centrés aux nœuds.

La méthode cell-vertex permet d’écrire facilement des opérateurs du premier et du second ordre pour des maillages non-structurés. L’opérateur du premier ordre est obtenu en calculant un gradient à la cellule après la phase d’assemblage, et la distribution est ensuite effectuée en faisant une moyenne volumique. Pour obtenir l’opérateur du second ordre, il suffit de remplacer la moyenne volumique de l’opérateur du premier ordre par une intégration surfacique sur le bord du volume de contrôle au nœud. Les défauts de cette méthode sont le temps de calcul pour les diverses opérations gather-scatter ainsi que la non-dissipation d’erreur numérique haute fréquence. Dès lors cette méthode implique l’utilisation de termes de diffusion artificielle appelée viscosité artificielle pour stabiliser les calculs.

3.2 Schémas numériques

Les schémas numériques dans AVBP sont nombreux, et sont adaptés aux maillages non-structurés et aux contraintes d’un calcul LES. En effet les maillages non-structurés sont gérés par une table de connectivité, qui limite fortement la longueur de stencil des schémas pour des raisons de coût. Pour les écoulements diphasiques, deux schémas sont utilisés. Le schéma TTGC développé par Colin and Rudgyard [2000] pour les calculs LES gazeux a été directement appliqué à la phase dispersée. Le schéma PSI a été intégré plus tard dans AVBP par Lamarque [2007], afin de remédier à un certain manque de

robustesse de TTGC. Il est associé à un schéma Lax-Wendroff pour la phase gazeuse.

3.2.1 Le schéma TTGC

Le schéma TTGC (Two-Step Taylor Galerkin Colin, [Colin and Rudgyard \[2000\]](#)) est un schéma centré spatio-temporel de type éléments finis linéaires d'ordre 3 en temps et en espace. Le schéma est réalisé en deux étapes, suivant le principe de prédiction-correction :

$$\tilde{u}^n = u^n + \alpha \Delta t \frac{\partial u^n}{\partial t} + \beta \Delta t^2 \frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} \quad (3.2)$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\Theta_1 \frac{\partial u^n}{\partial t} + \Theta_2 \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial t} \right) + \Delta t^2 \left(\varepsilon_1 \frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} + \varepsilon_2 \frac{\partial^2 \tilde{u}^n}{\partial t^2} \right) \quad (3.3)$$

avec $\alpha = 1/2 - \gamma$, $\beta = 1/6$, $\Theta_1 = 0$, $\Theta_2 = 1$, $\varepsilon_1 = \gamma$ et $\varepsilon_2 = 0$, et où γ est un paramètre permettant de faire varier les propriétés du schéma. Dans AVBP, la valeur de γ communément utilisée est 0.01. Les dérivées temporelles sont retrouvées à partir des dérivées spatiales.

L'intérêt de ce schéma est qu'il possède d'excellentes propriétés à haute fréquence. La figure 3.2 ([Colin and Rudgyard \[2000\]](#)) montre les erreurs de dissipation et de dispersion à $CFL = 0.01$ avec le schéma TTGC (TTGC(0.01)) et d'autres schémas (Lax Wendroff et autres schémas de type Galerkin) en fonction de la fréquence. On remarque que l'erreur de dissipation est faible pour tous les schémas (comprise entre 1 et 0.940) quelle que soit la fréquence. On remarque cependant que le schéma LW-VF est dispersif dès les basses fréquences, alors que les schémas de type Galerkin (dont TTGC) ne deviennent dispersifs qu'à partir d'une certaine fréquence (dans ce cas autour de $p = 0.5\pi$). Ces caractéristiques sont capitales pour la LES, étant donné que la dispersion du schéma peut changer la répartition de l'énergie sur les échelles de turbulence, et donc modifier la physique de l'écoulement (en accumulant beaucoup d'énergie à haute fréquence de manière numérique). Ces propriétés sont aussi intéressantes pour la résolution des sprays. En effet, ce type d'écoulement est caractérisé par la présence de fronts de liquide, c'est-à-dire de zones où on passe d'une charge forte à faible sur une très petite distance, produisant une très forte dispersion avec les schémas centrés d'ordre élevé. La relativement faible erreur de dispersion de TTGC est donc très intéressante pour la phase dispersée. Néanmoins une erreur de dispersion non négligeable subsiste, et il est nécessaire d'appliquer une viscosité artificielle. Ce point est détaillé dans la section 3.3, et est capital dans le cas des écoulements à phase dispersée.

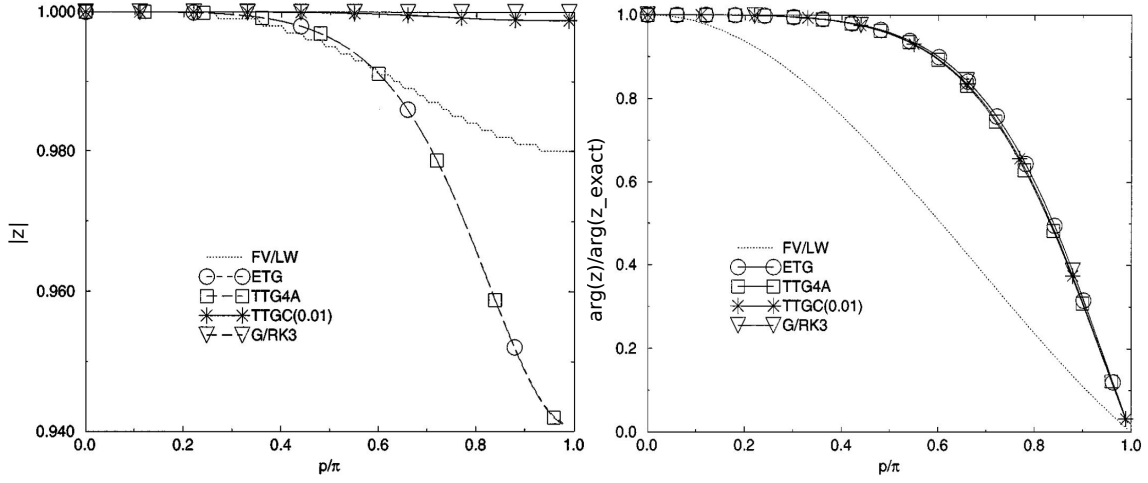


FIGURE 3.2 – erreur de diffusion (gauche, module du facteur d’amplification z) et de dispersion (droite, argument du facteur d’amplification sur argument du facteur d’amplification exact) en fonction de la fréquence pour les différents schémas de AVBP (Colin and Rudgyard [2000]).

3.2.2 Le schéma PSI

Le schéma PSI est un schéma à résidus distribués de type décentré. L’intérêt du décentrement est la possibilité d’obtenir un schéma défini positif et TVD (Total Variation Diminishing) qui rend inutile la viscosité artificielle. Le principe de ce schéma est une distribution du résidu de chaque cellule en fonction de la vitesse de l’écoulement (figure 3.3, Lamarque [2007], Roux [2009]). Les détails de cette section sont issus de Lamarque [2007]. Considérant l’équation de convection linéaire suivante à la vitesse c_i de la quantité u :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c_i \frac{\partial u}{\partial x_i} = 0 \quad (3.4)$$

On peut définir le flux :

$$\mathcal{F}_i = c_i u \quad (3.5)$$

et le résidu R_e à chaque cellule K_e de mesure V_e :

$$R_e = \frac{1}{V_e} \int_{K_e} \frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial x_i} dV \quad (3.6)$$

Dans l’approche cell-vertex présentée ici, l’enjeu est de calculer le résidu N_j des nœuds du maillage :

$$\frac{dU_j}{dt} = -N_j \quad (3.7)$$

où U_j est l’évaluation de u au nœud j . Ce résidu est calculé à partir du résidu des cellules adjacentes :

$$N_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in D_j} D_{j,e} V_e R_e \quad (3.8)$$

3.2 Schémas numériques

où D_j est le volume de contrôle du nœud j et V_j sa mesure. $D_{j,e}$ est ici une matrice de distribution qui permet de partager le résidu du centre de la cellule K_e au nœud j . Tout l'enjeu d'un schéma à résidus distribués est la définition de cette matrice de distribution.

Le principe de la distribution du résidu pour le schéma PSI est que seuls les nœuds en aval de l'écoulement doivent recevoir une contribution du résidu (figure 3.3). Si il y a un seul nœud en aval de l'écoulement, il reçoit tout le résidu. Sinon, on détermine la distribution en projetant la vitesse de l'écoulement le long des arêtes (figure 3.4). Pour cela on introduit les grandeurs suivantes :

$$k_l = -\frac{1}{d} c_i S_{l,i} \quad (3.9)$$

$$k_l^+ = \max(0, k_l) \quad (3.10)$$

$$k_l^- = \min(0, k_l) \quad (3.11)$$

$$U_{e,in} = \frac{\sum_{l \in K_e} k_l^- U_l}{\sum_{l \in K_e} k_l^-} \quad (3.12)$$

où k_l est la projection du flux sur la normale S_l du nœud l , et où $U_{e,in}$ correspond à la valeur de u dans la cellule K_e au point d'entrée de l'écoulement. Grâce à ces quantités, on peut définir la matrice de distribution du schéma Narrow :

$$D_{j,e}^N = \frac{k_j^+ (U_j - U_{e,in})}{V_e R_e} \quad (3.13)$$

La matrice de distribution du schéma PSI est alors une limitation du schéma Narrow (Sidilkover and Roe [1995]) :

$$D_{j,e}^{PSI} = \frac{\max(0, D_{j,e}^N)}{\sum_{l \in K_e} \max(0, D_{l,e}^N)} \quad (3.14)$$

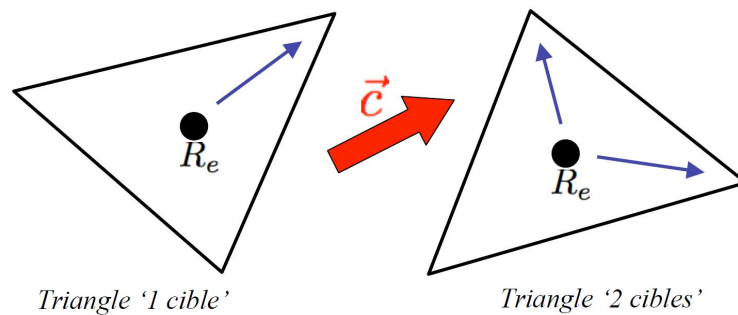


FIGURE 3.3 – Principe des schémas à résidus distribués décentrés : triangle à une cible (un nœud aval, droite) et triangle à deux cibles (deux nœuds aval, gauche).

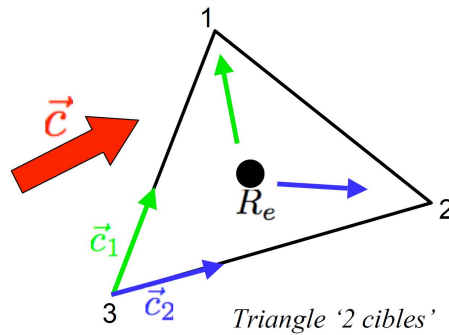


FIGURE 3.4 – Principe de la distribution des résidus pour les schémas Narrow et PSI pour un triangle à deux cibles.

3.3 Viscosité artificielle

La viscosité artificielle dans AVBP a été introduite à l'origine pour la phase gazeuse puis a été étendue à la phase liquide par Kaufmann et al. [2004] et Riber [2007]. La viscosité artificielle permet d'assurer la convergence en dissipant les très forts gradients ou les oscillations haute fréquence. L'idée remonte aux travaux de von Neumann and Richtmeyer [1950] pour le traitement des ondes de choc. Toute la difficulté dans l'utilisation de la viscosité artificielle consiste à assurer la convergence sans pour autant pénaliser la précision du calcul.

Afin de limiter la perte de précision, l'opérateur de viscosité artificielle n'est jamais appliqué sur tout le domaine mais sur des zones marquées par des senseurs. Les senseurs sont des variables normées, définies aux cellules, comprises entre 0 et 1, indicatrices de zones de forte variation locale d'une variable analysée. Le senseur vaut 0 quand aucune viscosité artificielle n'est nécessaire et 1 dans le cas contraire. La viscosité artificielle s'applique de deux façons, soit avec un opérateur du deuxième ordre, soit avec un opérateur du quatrième ordre :

- L'opérateur du deuxième ordre agit comme une viscosité classique. Il diffuse les gradients et introduit de la diffusion artificielle. Le paramètre utilisateur associé à cet opérateur est $\epsilon^{(2)}$.
- L'opérateur du quatrième ordre agit comme un bi-Laplacien et élimine principalement les hautes fréquences. On l'appelle opérateur d'hyperdiffusion artificielle. Cet opérateur s'applique lorsque le premier opérateur ne s'applique pas. Le paramètre utilisateur associé à cet opérateur est $\epsilon^{(4)}$.

3.3.1 Les senseurs

Pour la phase gazeuse les senseurs sont basés sur la pression ou l'énergie totale ainsi que sur les fractions massiques des espèces. Pour la phase liquide, le problème est plus compliqué puisqu'il n'y a pas de variable de pression. Certains senseurs analysent donc toutes les variables transportées de la phase

liquide (Riber [2007]) alors que d'autres ne se concentrent que sur certaines variables (Martinez [2010]).

Pour la phase liquide, deux types de senseurs sont utilisés :

- Un senseur ζ_{extr} basé sur les extrema : ce senseur vérifie si les variables de densité de nombre de gouttes, fraction volumique de liquide et diamètre des gouttes ne prennent pas de valeur non physique. Ce senseur est nécessaire du fait que les schémas ne conservent pas les valeurs extrêmes d'une variable et qu'il est possible d'avoir par exemple des fractions volumiques négatives ou supérieures à 1.
- Un senseur ζ_{tpf} basé sur l'analyse de gradients et dont le but est de repérer les instabilités numériques.

Chaque senseur est évalué à la cellule Ω_j , et le maximum de ces deux senseurs est utilisé.

Différentes formulations du senseur ζ_{tpf} sont utilisées dans AVBP et présentées ci-dessous.

Le senseur "Jameson-Riber" (JR)

Le senseur 'Jameson' utilisé sur la phase gazeuse a été adapté à la phase liquide par Riber [2007]. Ce senseur $\zeta_{tpf,\Omega_j}^{JR}$ est en fait le maximum de tous les senseurs appliqués aux variables transportées de la phase liquide. Ainsi :

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}^{JR} = \max [\zeta_{tpf,\Omega_j}(\alpha_l), \zeta_{tpf,\Omega_j}(u_l), \zeta_{tpf,\Omega_j}(\delta\theta_l), \zeta_{tpf,\Omega_j}(h_l), \zeta_{tpf,\Omega_j}(n_l)] \quad (3.15)$$

Pour chaque variable de la phase dispersée S_{tpf} , deux estimations de la variation à la cellule sont utilisées :

$$\Delta_1^k = S_{tpf,\Omega_j} - S_{tpf,k} \quad \text{et} \quad \Delta_2^k = (\vec{\nabla} S_{tpf})_k \cdot (\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) \quad (3.16)$$

S_{tpf,Ω_j} est la valeur à la cellule alors que $S_{tpf,k}$ est la valeur au nœud. $(\vec{\nabla} S_{tpf})_k$ est le gradient de S_{tpf} au nœud k calculé dans AVBP. Δ_1^k représente la variation de la quantité S_{tpf} dans la cellule alors que Δ_2^k représente la variation de S_{tpf} sur un stencil plus large puisqu'il utilise les cellules voisines au nœud k .

Ces estimations permettent de définir le senseur de Jameson appliqué à la variable S_{tpf} :

$$\zeta_{\Omega_j}^j(S_{tpf}) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |S_{tpf,k}|} \quad (3.17)$$

Le terme $|S_{tpf,k}|$ au dénominateur est une valeur de référence pour la normalisation, qui permet au senseur de rester défini, si le champ de S_{tpf} est constant et que Δ_1^k et Δ_2^k . L'adaptation réalisée par Riber [2007] consiste à utiliser des senseurs de 'Jameson' pour toutes les variables de la phase liquide avec des valeurs de normalisation adaptées aux spécificités de la phase liquide.

Les senseurs pour chaque variable sont explicités ci-dessous :

- fraction volumique

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}(\alpha_l) = \max_{k \in \Omega_j} \left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{(|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |\rho_l \alpha_{l,k}|)} \right)^2 \quad (3.18)$$

- vitesse

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}(u_l) = \max_{k \in \Omega_j} \left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + \rho_l c_{\Omega_j}} \right) \quad (3.19)$$

où c_{Ω_j} est une mesure locale de la vitesse caractéristique évaluée par : $c_{\Omega_j} = V_{\Omega_j}^{1/3} / \Delta t$, où V_{Ω_j} représente le volume de la cellule. Les fluctuations nœud à nœud sur la vitesse sont faibles par rapport à cette vitesse locale sauf si de fortes oscillations apparaissent. Par conséquent le senseur $\zeta_{tpf,\Omega_j}(u_l)$ reste petit sauf si de forts gradients locaux de vitesse sont détectés.

- RUE

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}(\delta\theta_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |\rho_l \alpha_{l,k} \delta\theta_{l,k}|} \quad (3.20)$$

- enthalpie

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}(h_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |\rho_l \alpha_{l,k} h_{l,k}|} \quad (3.21)$$

- densité en nombre de gouttes

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}(n_l) = \left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{(|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + n_{l,k})} \right)^2 \quad (3.22)$$

Le principal défaut de ce senseur est qu'il s'active très souvent puisqu'il est calculé sur toutes les variables. De plus le senseur de Jameson a été conçu pour des écoulements aérodynamiques stationnaires et a tendance à se déclencher beaucoup trop souvent dans des simulations LES.

Le senseur de "Colin"

Devant les limitations du senseur de Jameson, Colin [2000] a proposé un nouveau senseur ne se déclenchant pas quand l'écoulement est suffisamment résolu et se déclenchant fortement pour les zones de forte non-linéarité. Le senseur de Colin pour la phase liquide est identique à la formulation de Colin pour la phase porteuse. Il s'applique à toutes les variables transportées de la phase liquide. Ce senseur est défini par :

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}^C = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{\Psi - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (3.23)$$

avec :

$$\Psi = \max_{k \in \Omega_j} \left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + \varepsilon_1 S_{tpf,k}} \zeta_k^J \right) \quad (3.24)$$

$$\zeta_k^J = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + S_{tpf,k}} \quad (3.25)$$

$$\Delta^k = |\Delta_1^k - \Delta_2^k| - \varepsilon^k \max \left(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k| \right) \quad (3.26)$$

$$\varepsilon^k = \varepsilon_2 \left(1 - \varepsilon_3 \frac{\max \left(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k| \right)}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + S_{tpf,k}} \right) \quad (3.27)$$

Les valeurs numériques utilisées dans AVBP ont été fixées par [Colin \[2000\]](#) :

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \quad \delta = 1.10^{-2} \quad \varepsilon_1 = 1.10^{-2} \quad \varepsilon_2 = 0.95 \quad \varepsilon_3 = 0.5 \quad (3.28)$$

Le senseur de "Colin-Martinez" (CM)

Ce senseur est adapté de la formulation du senseur Colin. Il a été créé pendant la thèse de [Martinez \[2010\]](#) spécialement pour le cas de l'injection directe. La principale différence avec le senseur classique de Colin est qu'au lieu d'utiliser une valeur au nœud pour la normalisation, on utilise une valeur moyenne à la cellule. De plus les variables utilisées pour l'identification des instabilités numériques ne sont pas les mêmes.

Comme le senseur détecte un problème déjà existant, donc *a posteriori*, la valeur au nœud peut être extrême et si elle est utilisée comme valeur de normalisation, le senseur est sous estimé (valeur très grande) ou sur-estimé (valeur très petite). Inversement si la valeur est petite, le senseur est sur-estimé. De plus une variable comme la fraction volumique de liquide peut varier en espace de plusieurs ordres de grandeur : prendre une valeur moyenne à la cellule permet d'avoir une valeur de normalisation moins locale et plus représentative du champ. On aurait pu prendre une valeur encore plus filtrée en prenant la

moyenne sur toutes les cellules adjacentes à la cellule Ω_j , mais cela aurait entraîné un surcoût de calcul trop important en comparaison du bénéfice. Le sensur est calculé à partir de la fraction volumique et du diamètre des gouttes. Le sensur sur la fraction volumique permet de contrôler la masse de liquide qui subit de forts gradients. Le diamètre n'est pas une variable transporté. Il est reconstruit à partir de la fraction volumique de liquide et de la densité en nombre par la relation :

$$d = \left(\frac{6\alpha_l}{n_l\pi} \right)^{1/3} \quad (3.29)$$

Si les champs de fraction volumique et de densité en nombre sont strictement proportionnels, alors l'erreur numérique est identique pour ces deux variables et le diamètre reste constant. Dans le cas où ces deux champs ne sont pas proportionnels (en évaporation par exemple), ils sont propagés différemment et les erreurs numériques sont différentes. Le diamètre résultant est très sensible aux erreurs numériques et s'avère un bon indicateur.

De plus, le diamètre intervient directement dans le calcul des termes d'échange avec la phase porteuse, et il est important de contrôler son erreur pour ne pas entrer dans une boucle instable.

Le sensur final est le maximum du sensur sur le diamètre et du sensur sur la fraction volumique :

$$\zeta_{t pf, \Omega_j}^{CM} = \max [\zeta_{t pf, \Omega_j}(\alpha_l), \zeta_{t pf, \Omega_j}(d_l)] \quad (3.30)$$

$$\zeta_{t pf, \Omega_j} = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{\Psi' - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (3.31)$$

avec :

- fraction volumique de liquide :

$$\Psi'(\alpha_l) = \max_{k \in \Omega_j} \left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + K_1 \varepsilon_1 \rho_l \alpha_{l, \Omega_j}} \zeta_k^J(\alpha_l) \right) \quad (3.32)$$

et :

$$\zeta_k^J(\alpha_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + 5\rho_l \alpha_{l, k}} \quad (3.33)$$

- diamètre moyen :

$$\Psi'(d_l) = \max_{k \in \Omega_j} \left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + 2\varepsilon_1 d_{l, \Omega_j}} \zeta_k^J(d_l) \right) \quad (3.34)$$

et :

$$\zeta_k^J(d_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + K_2 d_{l, k}} \quad (3.35)$$

Les autres paramètres numériques sont identiques à ceux utilisés pour le senseur de Colin classique. Le senseur CM peut être adapté aux conditions de l'écoulement grâce aux paramètres K_1 et K_2 . Ces deux paramètres déterminent la valeur de normalisation des senseurs. En pratique, le paramètre K_2 pour le diamètre est fixé à 2, et seul le paramètre K_1 pour la fraction volumique est modifié. L'influence de ce paramètre est étudiée dans la section suivante, pour des valeurs $K_1 = 5$ et $K_1 = 10$. On utilisera les notations CM1, CM5 et CM10 pour les senseurs CM avec $K_1 = 1, 5$ et 10 . Le senseur CM1 est équivalent au senseur Colin.

3.4 Analyse préliminaire des senseurs de viscosité artificielle

Le but de cette section est d'évaluer de manière analytique les senseurs de viscosité artificielle. Dans la section 3.3.1, on a vu que les fortes non-linéarités étaient évaluées par les quantités Δ_1 et Δ_2 (Eq. 3.16), qui peuvent être assimilées à deux évaluations du gradient à un nœud du maillage. La non-linéarité est croissante avec la différence entre ces deux évaluations.

La figure 3.5 montre la valeur des senseurs JR (gauche) et Colin (droite) en fonction des gradients Δ_1 et Δ_2 , pour une valeur de référence de 20. On remarque une grande différence dans la manière dont s'activent ces deux formes de senseur. Le senseur JR s'active très progressivement à partir d'une très faible non-linéarité, alors que le senseur Colin montre bien son comportement en tangente hyperbolique, s'activant brusquement à partir d'une valeur seuil.

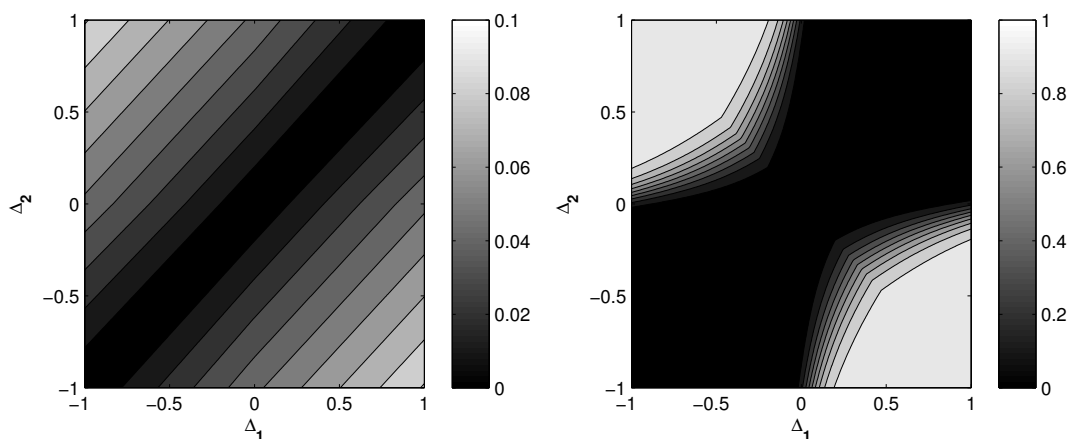


FIGURE 3.5 – Valeur du senseur de viscosité artificielle en fonction des gradients Δ_1 et Δ_2 avec une valeur de référence de 20, pour le senseur JR (gauche) et le senseur Colin (droite).

Sur la figure 3.6, on compare ici 4 senseurs : JR, Colin, CM5 et CM10. On remarque de nouveau que le senseur JR s'active de manière linéaire en fonction de la discontinuité, là où les senseurs de type

Colin (Colin, CM5 et CM10) s'activent brusquement à partir d'une valeur seuil. On voit ici l'intérêt des senseurs CM. En effet, en modifiant la valeur de référence par un certain facteur (5 pour CM5, 10 pour CM10), on retarde l'activation de la viscosité artificielle, et on laisse les non-linéarités se développer, ce qui peut être un critère important pour ne pas trop détériorer la précision du schéma. Le senseur JR s'active dès qu'une faible non-linéarité se développe, ce qui réduit la précision du schéma (même si cela amène plus de robustesse). Le choix de la constante du senseur CM est cependant un paramètre à fixer en fonction de l'application, même si la valeur 5 a déjà fonctionné dans de nombreux cas (Martinez [2010], Sanjosé [2009], Vié et al. [2010b]).

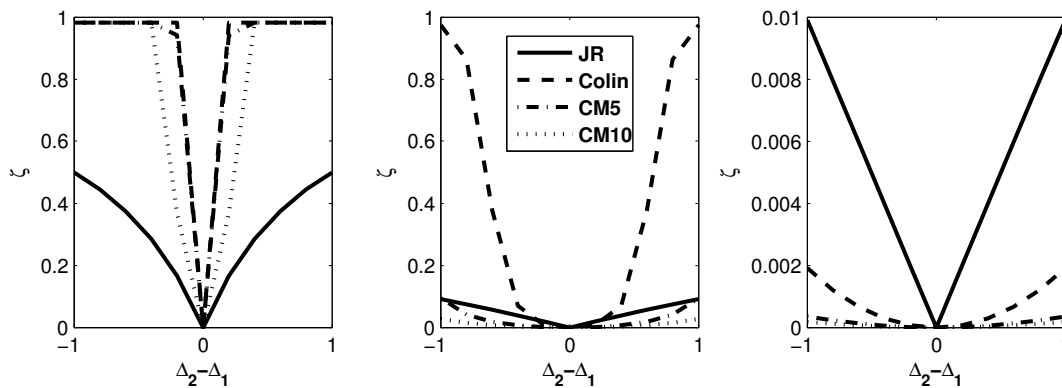


FIGURE 3.6 – Valeur du senseur de viscosité artificielle en fonction de la différence entre les deux gradients $\Delta_2 - \Delta_1$ avec une valeur de référence de 1 (gauche), 10 (centre) et 100 (droite), pour les senseurs JR (cercles), Colin (triangles vers la droite), CM5 (triangles vers le haut) et CM10 (carrés).

3.5 Évaluation en convection pure 1D

Les performances des schémas de transport sont évaluées sur des cas 1D de convection pure. Nous étudions ici 3 stratégies numériques :

- le schéma TTGC + senseur JR,
- le schéma TTGC + senseur CM5,
- le schéma PSI sans viscosité artificielle.

3.5.1 Description du cas test

Le cas test de convection à vitesse constante est classique puisqu'il répond à une équation simple :

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l + u_{l,m} \frac{\partial}{\partial x_m} m_l = 0 \quad (3.36)$$

Il permet cependant de montrer les premières limites des stratégies numériques en imposant des conditions initiales mal discrétisées et/ou avec de fortes discontinuités.

Le maillage 2D de dimension $1m$ sur $1m$ est périodique selon la direction x et les conditions limites à $y = 0$ et $y = 1$ sont des murs glissants pour le liquide. La discrétisation selon x est de 25, 50, 100, 200, 400 ou 1000 cellules, et de 1 cellule selon y . Les discrétisations à 25 et 50 cellules correspondent à ce qu'on retrouve dans un calcul applicatif (10 points pour discrétiser une gaussienne dans [Martinez et al. \[2009\]](#), [Martinez \[2010\]](#)). La vitesse du gaz est nulle (calcul sans traînée). La vitesse du liquide est de $20m/s$ et est constante sur tout le domaine. Le nombre de CFL pour le liquide est 0.03 (proche de l'application finale de cette thèse). La condition initiale est choisie gaussienne ou en créneau sur la densité en nombre de gouttes, et constante en diamètre :

$$\text{Gaussienne : } \quad n_l(x) = 1 + 100. \exp\left(\frac{-(x-0.5)^2}{0.1^2}\right) \quad (3.37)$$

$$\text{Créneau : } \quad n_l(x) = 100 \quad \text{si } 0.3 < x < 0.7 \quad (3.38)$$

$$= 1 \quad \text{sinon} \quad (3.39)$$

Pour tous les tests avec TTGC, les coefficients de viscosité artificielle sont $\epsilon^{(2)} = 0.01$ et $t\epsilon^{(4)} = 0.001$. Deux types d'erreur sont étudiées : l'erreur globale et l'erreur locale. L'erreur globale est l'erreur relative en norme L2 entre la solution numérique et la solution exacte :

$$E_{globale} = \frac{\int_0^1 (n_l(x) - n_{l,exact}(x))^2 dx}{\int_0^1 n_{l,exact}(x)^2 dx} \quad (3.40)$$

L'erreur locale est l'erreur relative entre la solution numérique et la solution exacte en chaque point du domaine de calcul :

$$E_{locale}(x) = \frac{(n_l(x) - n_{l,exact}(x))^2}{n_{l,exact}(x)^2} \quad (3.41)$$

3.5.2 Condition initiale gaussienne

La condition gaussienne est une condition relativement régulière qui correspond aux profils radiaux injectés dans l'application finale de cette thèse ([Senoner et al. \[2009a\]](#)) ou pour l'injection Diesel dans [Martinez et al. \[2010\]](#). La figure 3.7 compare pour les 6 discrétisations la solution numérique après un cycle ($t_{cycle} = 0.05s$), pour les trois stratégies numériques étudiées. On remarque que les trois méthodes ne présentent aucune dispersion numérique pour ce cas test, quelle que soit la discrétisation. Le schéma PSI est naturellement sans dispersion, le schéma TTGC n'en présente pas grâce à la viscosité artificielle. D'un point de vue précision, on remarque que seule la méthode TTGC+CM5 est capable de capturer l'amplitude du signal gaussien à 25 cellules, là où il faut 200 cellules avec la méthode TTGC+JR, et là où même 1000 cellules sont insuffisantes pour le schéma PSI.

Sur la figure 3.8, on compare l'erreur globale pour les trois méthodes numériques en fonction de la discrétisation. La tendance observée sur la figure 3.7 est confirmée, à savoir que la méthode la moins précise est le schéma PSI, la méthode TTGC+CM5 est la plus précise, et la méthode TTGC+JR est

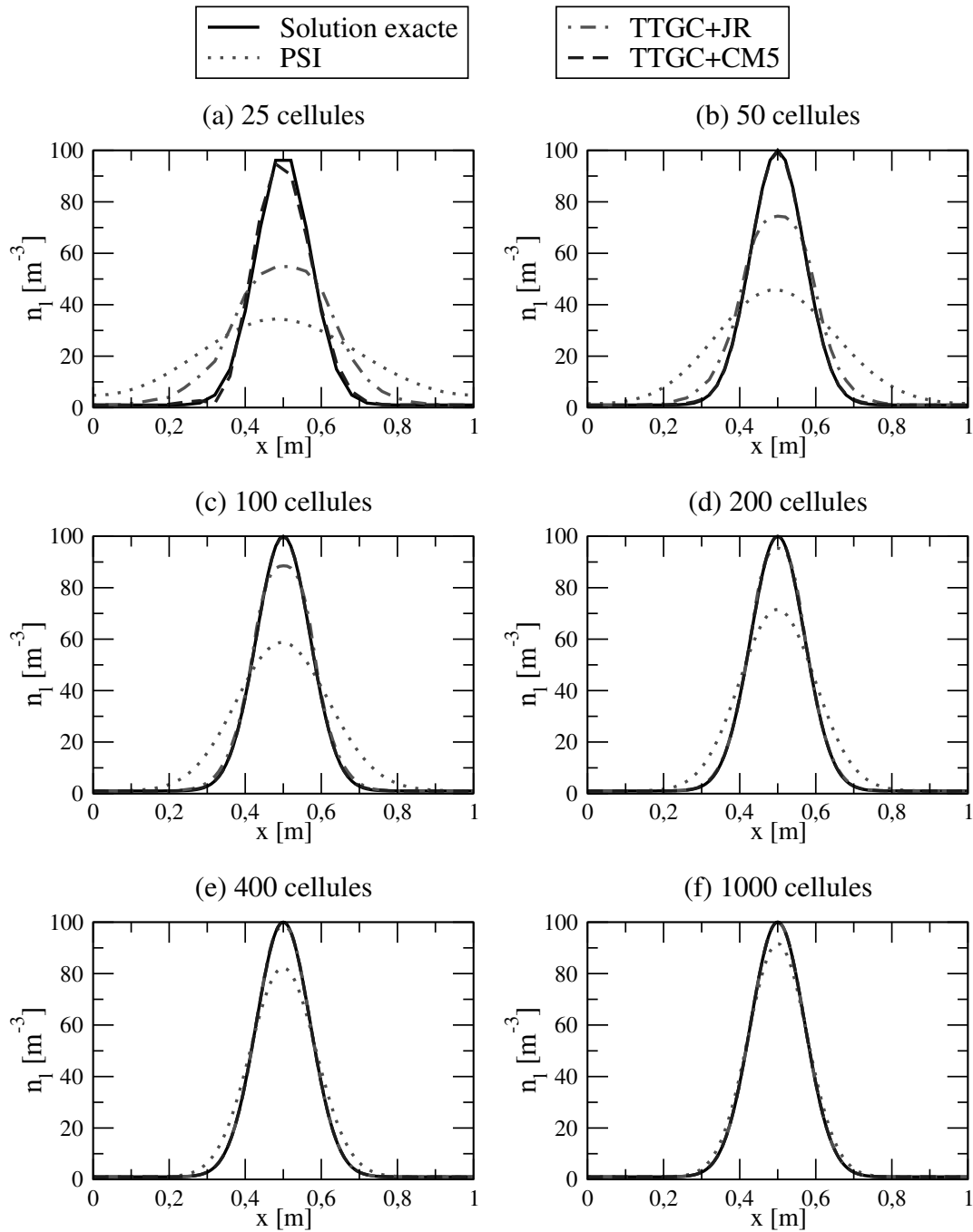


FIGURE 3.7 – Comparaison des profils de densité de nombre de gouttes entre la solution exacte (ligne continue) et la solution après un cycle pour PSI (ligne pointillée), TTGC+JR (ligne point-tiret), et TTGC+CM5 (ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules, pour une solution initiale gaussienne

intermédiaire. On remarquera surtout une large supériorité de TTGC+CM5 par rapport aux deux autres

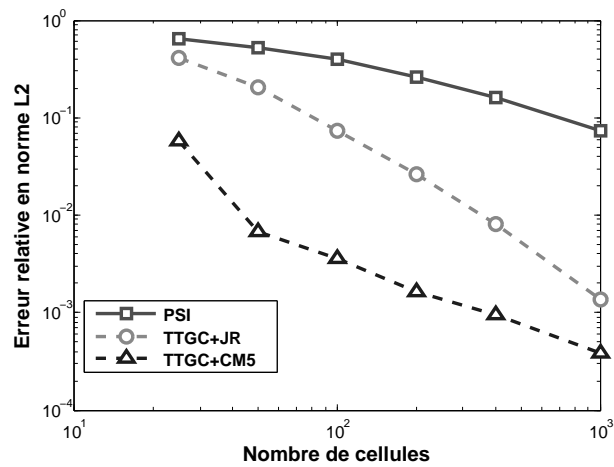


FIGURE 3.8 – Erreur relative en norme L2 de la convection d’une gaussienne en fonction du nombre de cellules, pour PSI (carrés), TTGC+JR (cercles) et TTGC+CM5 (triangles).

méthodes à faible résolution.

On peut aussi remarquer que les erreurs des méthodes TTGC+JR et TTGC+CM5 ont tendance à se rejoindre pour les grandes résolutions, ceci étant dû à la diminution de l’importance de la viscosité artificielle avec la diminution de la taille de maille. C’est ce que confirme la figure 3.9, où on compare l’erreur locale de TTGC+JR et TTGC+CM5. On note que les erreurs deviennent progressivement identiques, d’abord à l’extérieur de la gaussienne, puis progressivement vers l’intérieur, confirmant la diminution de la sensibilité à la viscosité artificielle.

3.5.3 Condition initiale en créneau

La condition en créneau correspond à l’injection. C’est la condition la plus difficile à reproduire, en raison de la très forte dispersion numérique des schémas d’ordre élevé sur les zones de forts gradients (Vichnevetsky and Bowles [1982]).

La figure 3.10 compare les résultats des trois méthodes après un cycle. La méthode TTGC+CM5 est celle qui capture le mieux le front, mais au prix d’une forte erreur de dispersion. Les méthodes TTGC+JR et PSI ne présentent pas de dispersion, mais diffusent beaucoup le profil, la méthode PSI étant la plus diffusive. On remarque aussi que le maximum du créneau n’est capturé qu’avec un nombre excessif de cellules, alors que la méthode TTGC+CM5 ne respecte pas le principe du maximum.

La figure 3.11 compare les erreurs globales des trois stratégies. Cette fois, la vitesse de convergence est identique pour les trois méthodes, mais la méthode TTGC+CM5 reste toujours la plus précise et la méthode PSI reste la moins précise.

Si on s’intéresse à l’erreur locale des stratégies TTGC (figure 3.12), la tendance est la même que

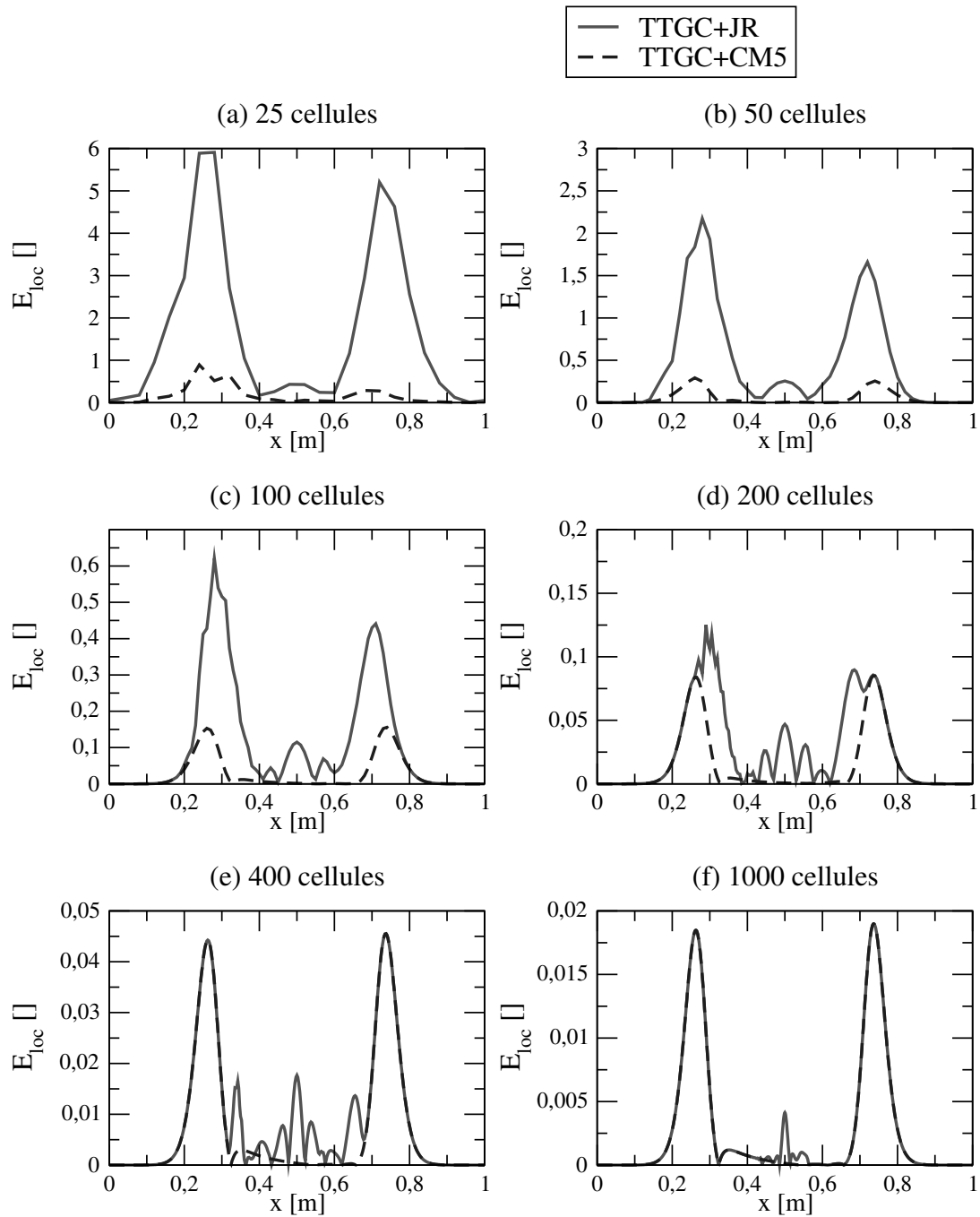


FIGURE 3.9 – Erreur relative locale de la convection d’une gaussienne pour TTGC+JR (ligne continue) et TTGC+CM5 (ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules.

précédemment. L’erreur de TTGC+CM5 est toujours inférieure à celle de TTGC+JR dans la zone de front, là où elle est la plus importante. Cependant l’erreur est plus grande pour TTGC+CM5 dans la zone de maximum du créneau, en raison de l’erreur de dispersion élevée.

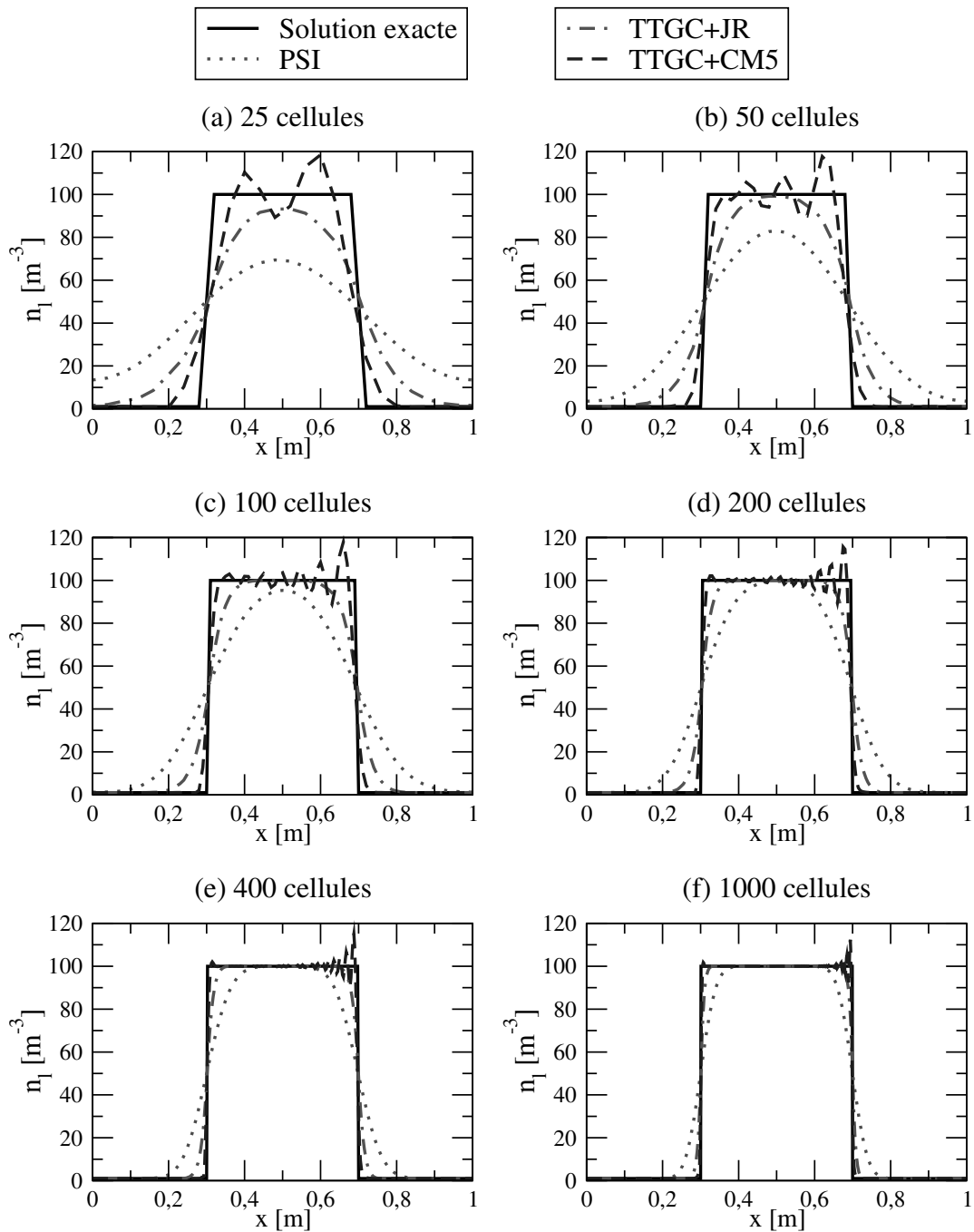


FIGURE 3.10 – Comparaison des profils de densité de nombre de gouttes entre la solution exacte (ligne continue) et la solution après un cycle pour PSI (ligne pointillée), TTGC+JR (ligne point-tiret), et TTGC+CM5 (ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules, pour une solution initiale en créneau.

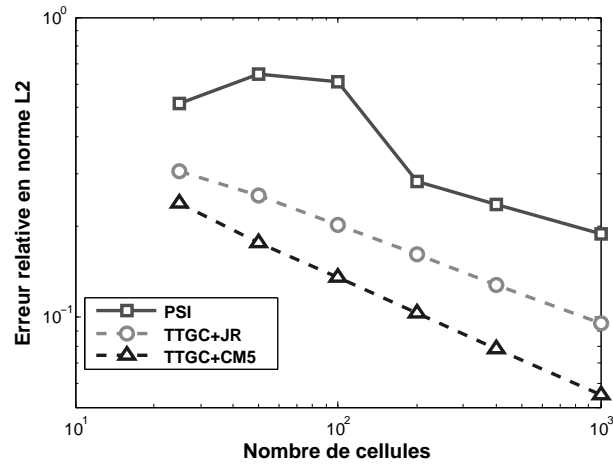


FIGURE 3.11 – Erreur relative en norme L2 de la convection d'un créneau en fonction du nombre de cellules, pour PSI(carrés), TTGC+JR(cercles) et TTGC+CM5(triangles).

3.6 Conclusion sur le traitement numérique de la phase dispersée

Les approches numériques disponibles dans AVBP ne sont pas tout-à-fait satisfaisantes. En effet, le schéma PSI est robuste, et respecte la positivité de la phase dispersée, mais est très diffusif. D'un autre côté, le schéma TTGC est délicat à utiliser, notamment pour le traitement des faibles fractions volumiques. Cela montre bien la nécessité de nouveaux schémas pour la phase dispersée dans AVBP.

Dans cette optique, les schémas cinétiques sont très prometteurs. Notamment utilisés pour la simulation de plasmas, ces schémas sont basés sur une reconstruction de la fdp à partir des moments. Ces méthodes ont un avantage fondamental sur toutes les approches numériques, parce qu'elles préservent l'espace des moments. De plus, l'avancement en temps est exact. Tout l'enjeu est dans le choix de la reconstruction de la fdp, qui détermine les propriétés numériques du schéma. Un tel schéma a été intégré au code MUSE3D (de Chaisemartin [2009]) et appliqué au calcul 3D sur maillage structuré dans les travaux de de Chaisemartin [2009]. Il a aussi été utilisé sur des méthodes d'évaporation d'ordre élevé dans Massot et al. [2010] et Kah [2010]. Cependant l'adaptation au calcul sur maillage non-structuré ou hybrides reste à faire. De plus, il est adapté pour les équations de transport fluide sans terme de pression (type "gaz sans pression"), et une adaptation aux équations de type gaz avec pression n'a pas été envisageable à ce jour.

Pour s'attaquer à ce problème, Boileau et al. [2010] proposent un schéma hybride traitant les deux types de dynamique : gaz sans pression et gaz avec pression. Les deux dynamiques sont traitées avec un schéma de relaxation (Chalons and Coulombel [2008]), et le choix de la solution sans pression ou avec pression est fait à partir d'un certain seuil d'énergie interne. De plus, ces schémas traitent les zones de vide. Ils sont cependant toujours écrits en maillages structurés.

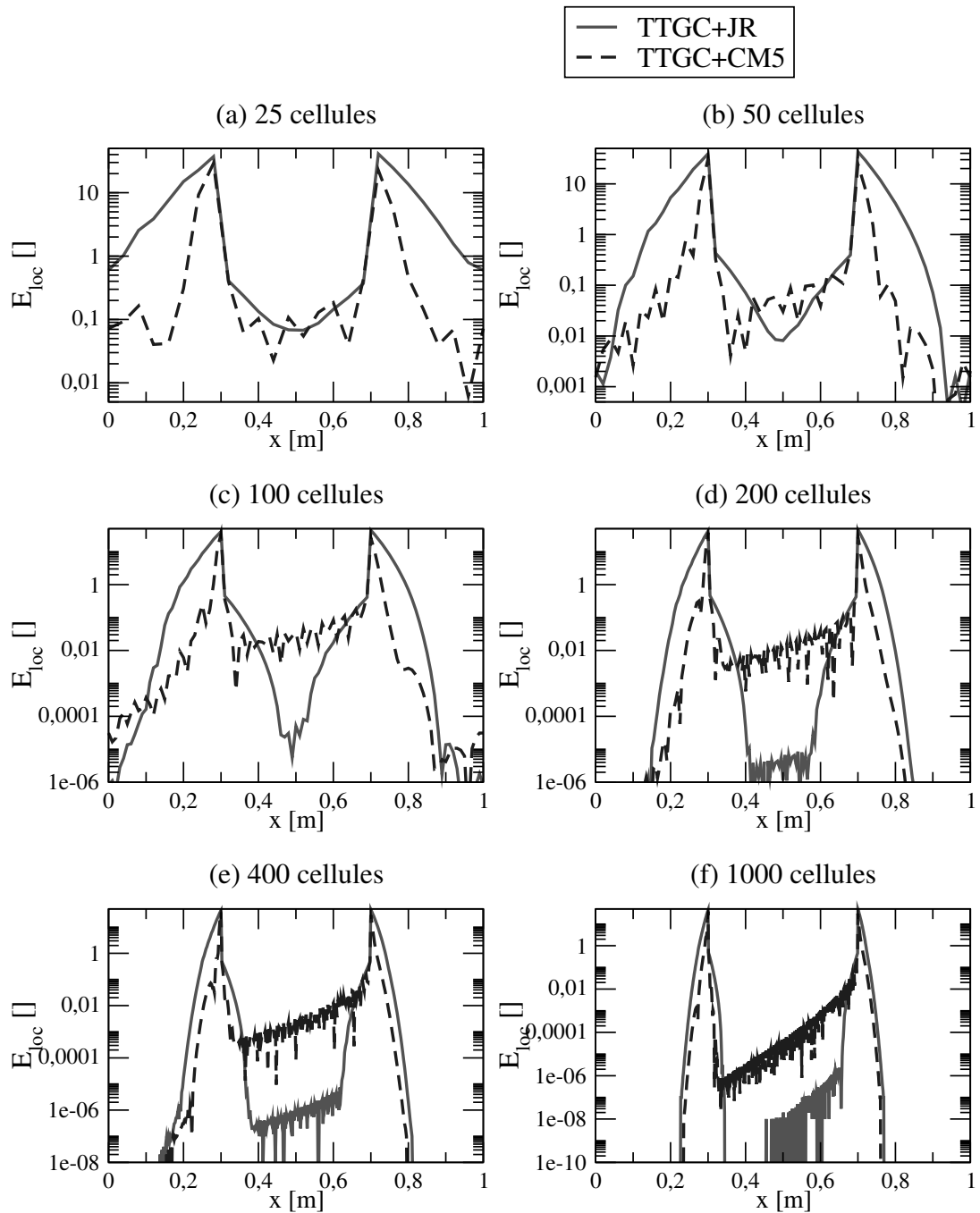


FIGURE 3.12 – Erreur relative locale de la convection d’un créneau pour TTGC+JR (ligne continue) et TTGC+CM5 (ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules.

