

Table des matières

Remerciements	ix
Résumé	xi
Table des matières	1
Introduction	7
La turbulence et les transferts thermiques en écoulement à bulles, un cas industriel	7
Les transferts de chaleur, une question explosive	8
La bulle au cœur de nos préoccupations	9
La simulation diphasique plus largement	10
La remontée d'échelle par la simulation fine comme méthode	10
Qu'est-ce que la Simulation Numérique Directe ?	10
L'approche à deux fluides	12
La suite de l'échelle, encore des moyennes	13
Méthodes et articulation de la thèse	14
Le numérique, une responsabilité supplémentaire pour un physicien	14
Plan de thèse	15
I Simulation de transferts thermiques sans saut de propriétés	17
1 SND des transferts thermiques dans les écoulements à bulles	19
1.1 Écoulements turbulents diphasiques à bulles	20
1.1.1 Hypothèses de modélisation dans chaque fluide	20
1.1.2 Conditions limites aux interfaces	21
1.1.3 La turbulence, les bulles, les sillages	22
1.2 Stratégies de résolution numériques	22
1.2.1 Stratégies de maillage	22

1.2.2	Localisation de l'interface	24
1.2.3	Discrétisation spatiale	25
1.3	SND diphasique thermique dans la littérature	26
1.3.1	La simulation de transferts de chaleur monophasique	26
1.3.2	La simulation diphasique	26
1.3.3	La simulation diphasique de transferts thermiques	27
1.4	Monofluide et suivi d'interface dans TrioCFD-IJK	28
1.4.1	Géométrie, conditions aux limites, discrétisation	28
1.4.2	Le suivi d'interface	29
1.4.3	L'expression monofluide, la dynamique	33
1.5	Résolution de l'équation d'énergie thermique	34
1.5.1	L'équation d'énergie thermique	34
1.5.2	La convergence des opérateurs utilisés	36
	Conclusions	39
2	Études des transferts thermiques en canaux	41
2.1	Présentation du cas du canal	42
2.1.1	Conditions aux limites	42
2.1.2	Changement de variable	42
2.1.3	Nombres adimensionnés	43
2.2	Écoulement moyen	45
2.2.1	La moyenne de Reynolds, une moyenne statistique	45
2.2.2	Application à l'équation diphasique de température	46
2.2.3	Équation moyenne en canal	48
2.3	Le canal de KAWAMURA, monophasique	49
2.3.1	Configuration	49
2.3.2	Étude en maillages	50
2.3.3	Dynamique de l'écoulement	50
2.3.4	Profil de température	52
2.3.5	Statistiques de fluctuations vitesse-température	55
2.3.6	Nombre de Nusselt pariétal	57
2.4	Le canal de DABIRI, diphasique à bulles	57
2.4.1	Configuration	57
2.4.2	La dynamique de l'écoulement à bulles en canal	60
2.4.3	Profil moyen des statistiques de température	62
2.4.4	Statistiques des fluctuations vitesse-température	65
2.4.5	Nombre de Nusselt de canal	68
	Conclusions	70

3 Étude en essaim de bulles	71
3.1 La physique d'un essaim homogène de bulles	72
3.1.1 Équations locales	73
3.1.2 Écoulement et transferts moyens	74
3.1.3 La mise en place du calcul	76
3.2 Convergence en maillage des simulations	77
3.2.1 Mise en place de 4 maillages	78
3.2.2 Convergence de la thermique	79
3.3 Étude en nombre de Prandtl à $Re = 400$	82
3.3.1 Vue d'ensemble	83
3.3.2 Invariance par adimensionnement	85
3.3.3 Nombre de Nusselt global	85
3.3.4 Modèles de nombre de Nusselt de la littérature	90
3.3.5 Nombre de Nusselt liquide	93
3.3.6 Utilisation d'une interpolation type Richardson pour le nombre de Nusselt liquide	96
3.4 Étude en nombre de Reynolds	97
3.4.1 Des champs dynamiques différents	100
3.4.2 Des champs thermiques différents	100
3.4.3 Une dépendance du nombre de Nusselt au nombre de Péclet	101
Conclusions	104
II Étude de schémas numériques pour la conservation de l'énergie thermique dans le cas de propriétés discontinues	105
4 FluidDyn : simulation de transferts thermiques en 1D	107
4.1 Introduction	108
4.1.1 Description du problème physique résolu	108
4.1.2 Architecture générale du simulateur	109
4.1.3 Définition du jeu de données	111
4.1.4 La simulation à un instant donné, calcul des flux	113
4.1.5 Correction des flux à proximité de l'interface	114
4.1.6 La gestion temporelle d'une simulation	117
4.2 Validation du code	118
4.2.1 Ordres d'interpolation et de convergences	119
4.2.2 Le cas sans saut de propriété : pseudo-monophasique	128
4.3 Études de la formulation monofluide avec discontinuités	134
4.3.1 Étude de convergence numérique de la perte d'énergie	136

4.3.2 Études de l'influence respective des erreurs de convection et de diffusion sur la perte d'énergie	136
4.3.3 Étude de l'influence des paramètres physiques sur la perte d'énergie	141
Conclusions	146
5 Conservation de l'énergie avec saut de propriétés	147
Introduction	148
5.1 Mathematical formulation of the Temperature One-Fluid method (TOF)	152
5.1.1 Front-tracking method (FT)	152
5.1.2 Hypotheses on the flow dynamics	152
5.1.3 Temperature equation in the local one-fluid paradigm	154
5.1.4 Numerical resolution of the flow dynamics	155
5.1.5 Finite volume, formulation choices	156
5.1.6 Discretization, finite difference interpolation	157
5.1.7 Temporal integration	159
5.1.8 Heat diffusion around a single bubble	159
5.2 TOF formulation, a conservation issue	160
5.2.1 A homogeneous bubbly flow	160
5.2.2 A 1D periodic bubbly flow with heat transfer	163
5.3 New formulations: quest for conservative and accurate formulations	171
5.3.1 Improvement of the temperature equation integration in the temperature formulation	171
5.3.2 Energy formulation	178
5.3.3 Convergence order of the ESP method	184
Conclusions	185
6 Application en 3D de la formulation conservative	189
6.1 Études 1D du passage en 3D de la méthode ESP	190
6.1.1 Correction des flux aux faces non diphasiques	192
6.1.2 Intégration en temps des fractions de surface mouillées	193
6.1.3 Utilisation de températures ghosts	194
6.1.4 Correction du flux diffusif	196
6.1.5 Formulation implémentée dans TrioIJK	198
6.2 Méthode numérique en 3D	199
6.2.1 Le calcul des faces mouillées	199
6.2.2 Interpolation de la température à l'interface	201
6.2.3 Interpolation de la température pour le calcul du flux convectif aux faces diphasiques	205

6.2.4 L'interpolation de la température pour le flux convectif avec les cellules ghosts	207
6.2.5 Résumé des étapes de correction du flux à proximité de l'interface	209
6.3 Cas test de validation	210
6.3.1 Validation de l'interpolation de la température à l'interface	210
6.3.2 Validation du calcul des faces mouillées et du barycentre .	212
6.3.3 Validation globale	213
Conclusions	214
Conclusion	215
Conclusion	215
Perspectives	216
Remerciements	217
A Études complémentaires 1D	219
A.1 Études de la formulation couplée Température-Énergie	219
A.2 Full monophasique	221
B Études de l'interpolation de la température et de son gradient à l'interface	223
B.1 Interpolation linéaire par morceau à l'ordre n	223
B.2 Interpolation mixte entre l'énergie et les conditions aux limites .	225
Bibliographie	227
Table des figures	239
Liste des tableaux	247

Introduction

Sommaire du présent chapitre

La turbulence et les transferts thermiques en écoulement à bulles, un cas industriel	7
Les transferts de chaleur, une question explosive	8
La bulle au cœur de nos préoccupations	9
La simulation diphasique plus largement	10
La remontée d'échelle par la simulation fine comme méthode	10
Qu'est-ce que la Simulation Numérique Directe ?	10
L'approche à deux fluides	12
La suite de l'échelle, encore des moyennes	13
Méthodes et articulation de la thèse	14
Le numérique, une responsabilité supplémentaire pour un physicien	14
Plan de thèse	15

La turbulence et les transferts thermiques en écoulement à bulles, un cas industriel

Depuis des années, le CEA se place dans le paysage des entreprises françaises en tant que référence dans le transfert d'expérience de la recherche à l'industrie. Au DM2S, Département de Modélisation des Systèmes et Structures, cette remontée de l'abstrait au concret s'incarne dans les efforts de remontée d'échelle développés pour transférer la compréhension des phénomènes locaux aux comportements de systèmes globaux. Les effets locaux sont étudiés à l'aide de simulations fines ou expérimentalement, et les phénomènes globaux sont principalement implementés dans le code système industriel de référence, Cathare. Il s'agit du logiciel principal de simulation complète de la thermo-hydraulique, mécanique et neutronique d'un

réacteur nucléaire. Un objectif du CEA est la mise en place d'un jumeau numérique complet d'une centrale. Un tel outil est ou pourrait être utilisé en amont, pour des études de sécurité, la conception et la validation par l'autorité de sûreté. Il s'inscrit aussi dans l'opérationnel, pour la formation des opérateurs et le contrôle en temps réel de la puissance. La turbulence de bulles et les transferts thermiques associés, sujets de cette thèse, s'inscrivent donc dans le cadre de la recherche aux échelles fines, en amont de la remontée d'échelles pour la thermo-hydraulique.

Les transferts de chaleur, une question explosive

Les transferts de chaleur au sein des écoulements sont un problème majeur pour la conception et le pilotage de toute centrale thermique refroidie par liquide. C'est le cas notamment des centrales nucléaires, dont le refroidissement présente en plus une importance évidente en termes de sécurité. C'est aussi le cas des centrales solaires par concentration. Dans les deux cas, la source de chaleur doit être refroidie de manière contrôlée de sorte que la température des parties en contact avec la source de chaleur soit maîtrisée. L'objectif est de rester dans les gammes que le matériaux est capable de supporter sans s'endommager de manière excessive. Le problème que l'on cherche typiquement à éviter est celui de la crise d'ébullition. Dans certaines conditions, les transferts de chaleur entre la source et le liquide sont trop importants et mènent à une trop grande production de vapeur. Cette vapeur commence à se former sous forme de bulles, de poches, puis de film en paroi. Dans ce cas, la vapeur ayant une conductivité thermique plus faible que le liquide, les transferts de chaleur vers le liquide diminuent brusquement. La température des parois monte et mène à une dégradation de celles-ci. Ce problème industriel majeur a mené à une recherche scientifique et industrielle phénoménologique sur des maquettes des parties du cœur concerné. En effet, les phénomènes en œuvre sont d'une grande complexité :

- turbulence
- nucléation
- évaporation
- recondensation
- transferts aux parois
- ...

Cette diversité de phénomènes et de régimes, représentés Fig. 1, est aujourd'hui partiellement décrite et peu comprise dans son ensemble. Les études et corrélations utilisées sont pour certaines tirées de relations phénoménologiques issues d'expérimentations. Ces études ont notamment lieu au CEA par exemple dans le cadre des thèses de BERNE [6], BRICARD [13] et MANON [58] avant les années 2000. Cette diversité de phénomènes rend la tâche de les séparer expérimentalement très compliquée. Suite à une amélioration sans précédent des capacités de calcul

ces 30 dernières années, la simulation numérique est de plus en plus utilisée pour la simulation et permet d'atteindre des degrés de description suffisant pour des conditions d'écoulement proches de conditions industrielles. Ces logiciels de simulations ont été développés petit à petit, traitant toujours davantage de phénomènes physiques. Aujourd'hui, bien qu'une bonne part des phénomènes physiques et numériques soient encore en étude, certains problèmes ont été levés pour le traitement de la dynamique des écoulements à bulles en simulation fine. C'est donc depuis quelques années au tour des transferts thermiques de faire l'objet d'un recherche de résolution numérique fiable. C'est dans ce cadre que la simulation des transferts thermiques dans les écoulements diphasiques intéresse particulièrement le milieu de la recherche sur la mécanique des fluides diphasiques numérique.

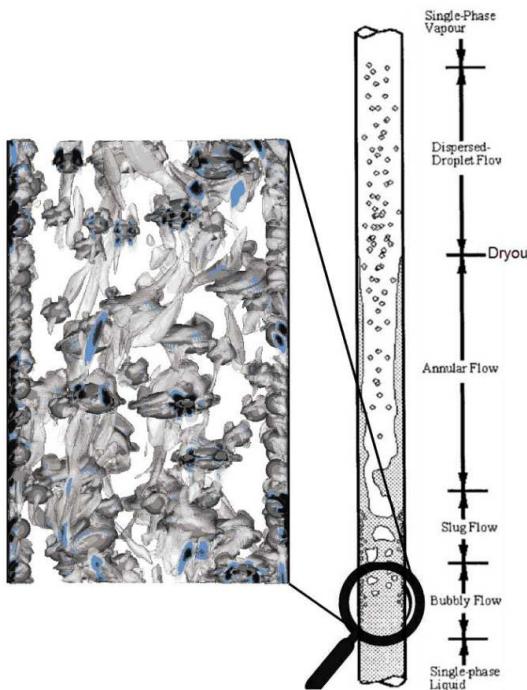


FIGURE 1 – Différents régimes d'ébullition selon le taux de vide. Les écoulements à bulles se situent avant l'apparition de la crise. Image tirée de [29].

La bulle au cœur de nos préoccupations

Le phénomène d'ébullition et de transfert de chaleur dans un liquide avec des bulles et entre le liquide et les bulles sont peu décrits dans la littérature. Les recherches les plus actives concernant des transferts de chaleur dans des écoulements complexes portent la plupart du temps sur des particules solides. Certaines

similarités peuvent être remarquées entre les approches et modélisations, mais les particules sont d'habitude considérées comme étant plus petites que l'échelle de Kolmogorov de la turbulence étudiée. Elles n'ont donc pas d'impact individuellement sur la turbulence. Au contraire les bulles induisent d'elles même différents phénomènes turbulents ou non : une oscillation naturelle due à leur déformabilité, des sillages moyens, la turbulence de sillages, une interaction turbulente de ces sillages. Ces trajectoires oscillantes et les sillages ont un effet direct sur la convection de la température dans la phase liquide.

La simulation diphasique plus largement

La simulation d'écoulement multiphasé a une portée plus grande que celle des écoulements à bulles. Qu'il s'agisse d'interface libre, d'écoulement à lit de particules fluidisé, de gouttes ou d'inversion de phase, toutes ces configurations sont des sujets de recherches actifs. Ils font aujourd'hui de plus en plus appel à la simulation numérique. Ainsi de nouvelles méthodes sont développées, il s'agit soit d'outils de résolution génériques, soit de réponses à un cas particulier. Les multiples cas d'application expliquent donc la diversité des méthodes numériques existantes et leurs nombreuses variantes. Ces méthodes numériques présentent chacune des avantages et des inconvénients, mais sont pour la plupart demandeuses d'une certaine complexité dans leur implémentation. Certaines demandent un réglage fin de méta-paramètres pour mitiger certains effets numériques indésirables dans la configuration simulée.

La remontée d'échelle par la simulation fine comme méthode

Qu'est-ce que la Simulation Numérique Directe ?

Comment définir la simulation numérique directe ? La question peut sembler naïve, mais n'est pas si futile. Serions-nous capables avec de telles simulations de mimer parfaitement un écoulement réel en supposant que les conditions initiales et aux limites imposées soient parfaites ? De créer une forme de *daimon* de Laplace restreint aux écoulements ? Une “intelligence qui, à un instant donné, connaîtrait toutes les forces dont la nature est animée et la situation respective des êtres qui la composent, si d'ailleurs elle était suffisamment vaste pour soumettre ces données à l'analyse, embrasserait dans la même formule les mouvements des plus grands corps de l'univers et ceux du plus léger atome ; rien ne serait incertain pour elle, et l'avenir, comme le passé, serait présent à ses yeux.”. Devant l'immensité d'un tel objectif, le doute est de mise.

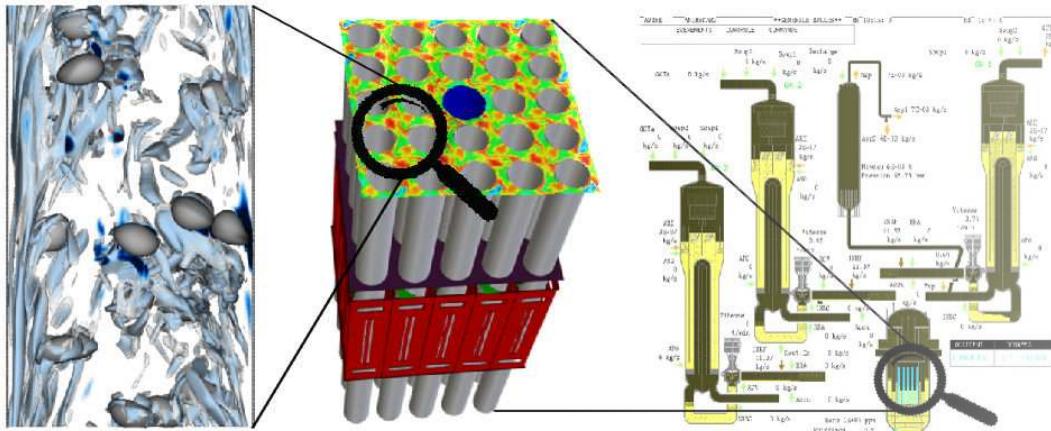


FIGURE 2 – Remontée d'échelle. La simulation la plus à gauche est réalisée avec TrioCFD-IJK et représente la turbulence aux échelles fines, la simulation au centre est faite à l'aide de NeptuneCFD et est le résultat d'une simulation dans le cadre Euler-Euler, et enfin à droite se trouve une simulation Cathare qui modélise le comportement d'une centrale nucléaire à l'échelle système. Image tirée de [29].

Un tout premier obstacle à la simulation directe se dresse : la mise en équation. Cette mise en équation, repose sur des hypothèses de comportement des fluides, dans le cadre de la mécanique des milieux continus. Ces hypothèses font d'ailleurs l'objet de la première section du premier chapitre de ce manuscrit. Ces hypothèses, forme de modélisation primaire, sont associées à une approximation des comportements physiques mésoscopiques mesurés. Ces comportements sont capturés dans leurs tendances statistiques dans certaines conditions (vitesse, pression, température, etc). À l'échelle de l'atome, ils ne se mesurent pas. Cependant, le saut d'échelle entre un atome et une particule fluide est tel dans les conditions qui nous intéressent, que ces moyennes sont réalisées sur de grandes quantités de molécules. Cela garantit un comportement très stable et bien décrit de ces lois. Il s'agit du cadre classique de la physique des milieux continus. C'est dans ce cadre là que la simulation numérique directe vise à percer le secret des fluides. Le modèle de ce cadre est différent de la modélisation qui est réalisée lors du changement d'échelle dont il est question dans ce manuscrit. Cette dernière pourrait être qualifiée de modélisation secondaire. Elle consiste à passer à une vision moyennée à deux fluides, dite Euler-Euler.

Une fois ces hypothèses acceptées, considérons que les fluides observés dans notre expérience ont exactement les mêmes propriétés que nos fluides simulés. Ou tout au moins que la différence provoquée par ces incohérences sont négligeables

au point de ne pas être mesurables. Imaginons que nous disposions de capacités de calcul sans limite. Sommes-nous capables de déterminer tous les mouvements, les transferts de chaleur, présent et futur d'un écoulement par la simulation ? Il est de bon ton de se rappeler que les mathématiciens les plus éminents n'ont pas encore réussi à démontrer l'existence et l'unicité de la solution de l'équation de Navier-Stokes... monophasique. Autant dire que les écoulements à bulles sortent du cadre mathématique dans lequel le physicien numéricien est assuré que ses schémas numériques sont consistants, stables sous certaines conditions et convergents.

Mais la simulation numérique directe est aussi porteuse de promesses. Promesse de remplacer une expérience, couteuse, par une simulation, moins couteuse. Mais surtout promesse de pouvoir s'affranchir des limitations de l'instrumentation. En effet, les résultats d'une simulation sont connus en tout point de l'espace simulé, en tout temps simulé. Autant de données qui permettent la mise en place de modèles précis, l'étude et l'analyse des différents phénomènes étudiés séparément les uns des autres. La simulation permet parfois même de produire des résultats dans des conditions que la nature ne peut reproduire. À l'heure de l'essor des méthodes d'apprentissage machine, ces quantités de données représentent la potentialité d'un jour découvrir de nouvelles méthodes de modélisation, plus précises, plus fiables.

Tentés par ces promesses, mais conscient de leur fragilité, quelle est donc la démarche à suivre pour ne pas tomber dans l'écueil de la confiance aveugle ? Si la simulation numérique directe n'a pas la prétention, ni de décrire le comportement d'un fluide réel, ni l'assurance d'en trouver la bonne solution, que faire ? Il reste à la simulation numérique la mesure de convergence, la conservation et la comparaison à l'expérience. La convergence vers une solution, supposée être statistiquement identique à la solution réelle, est mesurée à partir du résidu, ou de l'écart à une solution analytique ou par défaut à une solution plus fine. La conservation de certaines quantités, caractéristiques des phénomènes physiques étudiés, assure quant à elle que la solution est en partie cohérente physiquement. La comparaison à l'expérience est la validation ultime, mais elle n'est pas toujours accessible et les informations mesurées sont limitées. C'est à travers les prismes de la conservation et de la convergence que sera traitée la question de la simulation numérique dans cette thèse.

L'approche à deux fluides

L'approche à deux fluides, sus-mentionnée, aussi appelée Euler-Euler, est à mettre en correspondance dans le cadre monophasique avec la moyenne de Reynolds, appelée méthode RANS. L'approche RANS suppose l'existence d'une moyenne statistique de l'écoulement. Cette moyenne statistique est obtenue théoriquement en réalisant un grand nombre de fois la même expérience dans les mêmes conditions, et en moyennant en tout point de l'espace en tout temps les caractéristiques

de l'écoulement sur ces différentes réalisations. Cet opérateur de moyenne permet de décomposer une variable turbulente, comme la vitesse, en sa partie moyenne et sa partie fluctuante. La partie fluctuante est de moyenne nulle, mais est caractérisée par son moment d'ordre 2, c'est-à-dire la moyenne de son carré, qui n'est pas nulle. Dans la pratique, selon les symétries des configurations, ou les conditions aux limites, les physiciens ont recours à deux autres moyennes qui, suivant l'hypothèse d'ergodicité sont considérées équivalentes à une moyenne statistique. Il s'agit de la moyenne temporelle d'un écoulement dans le cas où il est statistiquement stationnaire et de la moyenne spatiale d'un écoulement dans une direction où il est statistiquement homogène. Dans tous les cas, cet opérateur permet d'accéder à une compréhension générale de l'écoulement en lissant les profils des champs. Il semble dès lors intéressant de moyenner directement les équations de Navier-Stokes et de résoudre ce champ moyen sur un maillage plus grossier que celui nécessaire à capturer les échelles de turbulence. Cela permet de s'affranchir de mailler suffisamment finement pour décrire toutes les échelles de turbulence. Cependant l'équation de Navier-Stokes ainsi modifiée n'est plus "fermée". Cela signifie qu'elle ne se suffit plus à elle-même pour la résolution, il manque une corrélation entre les différentes variables pour avoir autant d'inconnues que d'équations nécessaires à leur détermination. C'est cette partie, cette corrélation qui intéresse les physiciens puis les ingénieurs pour leur permettre de simuler l'écoulement moyen correspondant à leur configuration particulière.

Dans l'approche à deux fluides, chaque phase présente des caractéristiques moyennes. Un taux de présence de phase moyen remplace la localisation exacte de chaque phase. La phase vapeur a sa propre vitesse moyenne partout, de même que la phase liquide. Et de la même manière que dans le cas monofluide, appliquer ces opérateurs de moyenne de phase aux équations de Navier-Stokes demande ensuite de fermer les équations moyennées obtenues. À nouveau, nous avons besoin de modèles pour les fluctuations dans chaque phase et les transferts interfaciaux.

La suite de l'échelle, encore des moyennes

Cette étape de modélisation, permettant de simuler les écoulements moyens locaux, est loin de représenter la fin du processus de remontée d'échelle. Des moyennes par tranche de section de conduite sont réalisées, occultant cette fois les hétérogénéités sur une section et devant rendre compte des phénomènes internes à la section par la création de nouveaux modèles. Il s'agit de l'échelle composant. Ensuite des tuyaux entiers peuvent être moyennés sur leur hauteur, groupés en faisceaux, jusqu'à l'échelle dite système. À cette échelle, le comportement de chaque système est représenté par un modèle 0D ou faiblement discrétilisé par quelques éléments 1D et des jonctions pour les connecter, nourri des moyennes précédentes. Ainsi, un réacteur complet est modélisé. Et un tel modèle numérique de réacteur

permet, en temps réel, d'estimer des nappes de puissances, des températures de cœur, des pressions, de simuler un régime transitoire lors de l'apparition d'une brèche, etc. Tout cela en temps réel, sans supercalculateur.

Méthodes et articulation de la thèse

Le numérique, une responsabilité supplémentaire pour un physicien

Depuis l'expansion de l'utilisation de la simulation numérique, nous sommes forcés de constater que la complexité associée à un code informatique, ne facilite pas la démarche scientifique physique. En effet, ce type de code a recours à de nombreux méta-paramètres dans différents blocs, à différents niveaux, dont la présence est facilement occultée par une mauvaise documentation, voire une documentation inexistante. Il est aussi bon de rappeler que la technologie associée à l'informatique représente une telle somme de savoir que nul ne saurait en maîtriser les éléments sur toute la chaîne. Pour passer du code au résultat de simulation, les étapes sont nombreuses. Le code fait appel à de nombreuses librairies externes, dont le développement et le contenu n'est pas à la main du chercheur. Puis le code est traduit à la suite dans divers langages par un compilateur, avant de passer directement des instructions aux systèmes. Celles-ci sont elles-mêmes interprétées par l'OS avant d'être exécutées par le processeur. Les évolutions de formats, standards, versions, plateformes, rendent difficile l'atteinte du critère de reproductibilité, voire impossible. En effet, la plupart des firmwares ne sont pas à source ouverte. Enfin, les bogues étant courants et pouvant être d'impact différents sur la solution, la certitude d'obtenir des résultats fiables est fragile. En moyenne selon l'étude [32], un développeur produit environ 20 bogues pour 1000 lignes de code après la première compilation. Certains bogues sont même devenus historiques, conduisant par exemple à l'explosion en vol de la première fusée Ariane 5. Il est donc illusoire de considérer qu'en “faisant attention”, un chercheur, surtout physicien de formation, saura passer outre cette problématique.

Devant tant de défis, les informaticiens développent diverses méthodes, normes ou outils pour résoudre ces questions auxquelles ils sont eux-mêmes confrontés. Tout physicien numéricien marche donc au bord d'un précipice, retenu par quelques filets de bonnes pratiques et de bons outils. Aborder le sujet des outils et des normes est donc loin d'être accessoire quand, comme dans ce cas, l'étude physique repose uniquement sur des moyens informatiques. Les outils suivants ont été utilisés pour cette thèse (la liste n'est pas exhaustive) :

- les ressources de calcul d'Occigen du CINES et d'IRENE au TGCC,
- les OS Ubuntu et RedHat basés sur le noyau Linux,

- l'éditeur de texte *Vim* et de nombreux plugins,
- les langages de programmation Python, C++ et Bash,
- le gestionnaire de suivi de version *Git*,
- les codes open-source Trust, TrioCFD-IJK et FluidDyn développés au CEA,
- le module *PyTest* pour la mise en place de tests en Python,
- le module *Sphinx* pour la génération de documentation pour Python,
- le module *Jupyter Notebook* permettant la création de cahiers de laboratoire informatiques,
- les packages NumPy, pandas, SciPy et SymPy pour les opérations de post-traitement des données,
- le package de tracé de figures Matplotlib,
- et enfin le système de création de documents PDF, L^AT_EX, et son module de dessin TikZ.

Dans le mesure du possible, des efforts ont été faits pour que les résultats de la thèse soient open source, testés, validés et documentés ; en particulier pour les travaux réalisés avec FluidDyn. Je remercie la communauté du logiciel libre dans son ensemble sans laquelle cette thèse comme tant d'autres n'aurait pas pu être possible.

Plan de thèse

Cette thèse visait initialement à développer des modèles physiques de transferts thermiques à partir de simulations numériques réalisées dans des cas variés. Mes travaux précédents avaient porté sur l'apprentissage machine de la fermeture du tenseur de Reynolds dans le cadre RANS monophasique. J'étais donc disposé à étendre les méthodes et la recherche réalisée sur la turbulence monophasique au cas des transferts thermiques diphasiques. Cependant au cours de cette thèse, nous avons dû faire face à un problème d'ordre numérique imprévu. En effet, comme il sera présenté, la perte d'énergie dans le domaine simulé en présence de saut de propriétés thermiques avec la méthode monofluide est prohibitive. Un tel manque de conservation ne nous permettait pas d'étudier les cas prévus. Cette thèse s'articule donc en deux parties.

Une réponse à un besoin de modèles dans ces conditions. Dans la première partie, le code numérique est présenté, notamment la résolution des champs thermiques au Chap. 1. Puis des études en canaux sont réalisées pour la validation des performances thermiques en l'absence de saut de propriétés au Chap. 2. Les détails des modèles à deux fluides y sont introduits dans le cas général, puis adaptés au cas du canal. Pour finir, un cas simple mais nouveau dans la littérature, l'essaim de bulles, est simulé et analysé au Chap. 3. Ces résultats sont nouveaux

et pourrons notamment servir à la meilleure prise en compte des phénomènes de transfert entre les phases dans les approches Euler-Euler.

Une recherche de méthodes numériques fiables. Dans cette deuxième partie, une méthode numérique conservant l'énergie thermique est recherchée. Pour cela une maquette logicielle 1D de TrioCFD-IJK a été développée, il s'agit de FluidDyn qui est présentée au Chap. 4. La recherche d'une formulation conservatrice est détaillée au Chap. 5 et enfin les résultats de cette recherche sont reportés en 3D dans TrioCFD-IJK avec les adaptations présentées au Chap. 6.

Enfin, les perspectives dans la suite de ce travail seront dégagées.

Première partie

Simulation de transferts thermiques
sans saut de propriétés

Chapitre 1

SND des transferts thermiques dans les écoulements à bulles

Sommaire du présent chapitre

1.1 Écoulements turbulents diphasiques à bulles	20
1.1.1 Hypothèses de modélisation dans chaque fluide	20
1.1.2 Conditions limites aux interfaces	21
1.1.3 La turbulence, les bulles, les sillages	22
1.2 Stratégies de résolution numériques	22
1.2.1 Stratégies de maillage	22
1.2.2 Localisation de l'interface	24
1.2.3 Discrétisation spatiale	25
1.3 SND diphasique thermique dans la littérature	26
1.3.1 La simulation de transferts de chaleur monophasique	26
1.3.2 La simulation diphasique	26
1.3.3 La simulation diphasique de transferts thermiques .	27
1.4 Monofluide et suivi d'interface dans TrioCFD-IJK	28
1.4.1 Géométrie, conditions aux limites, discrétisation	28
1.4.2 Le suivi d'interface	29
1.4.3 L'expression monofluide, la dynamique	33
1.5 Résolution de l'équation d'énergie thermique	34
1.5.1 L'équation d'énergie thermique	34
1.5.2 La convergence des opérateurs utilisés	36
Conclusions	39

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la simulation d'écoulements à bulles sans changement de phase, dans le cas où les propriétés thermiques du liquide et de la vapeur sont les mêmes. Ces écoulements sont un premier pas vers la simulation avec changement de phase. Après une présentation des hypothèses physiques réalisées dans cette étude en Sec. 1.1, les méthodes de simulations numériques adaptées à la résolution de ces écoulements sont présentées en Sec. 1.2. Une revue de littérature des différentes simulations numériques réalisées sur des cas complexes est présentée en Sec. 1.3. Puis la méthode que nous utilisons, avec TrioCFD-IJK, est détaillée pour la résolution de la dynamique de l'écoulement en Sec. 1.4 et pour la résolution des transferts thermiques en Sec. 1.5.

1.1 Écoulements turbulents diphasiques à bulles

Les écoulements auxquels nous nous intéressons possèdent la particularité d'être à bulles, il y a donc la présence d'interfaces. La simulation numérique d'interfaces est un large domaine de recherche, aux méthodes qui lui sont propres. Il existe plusieurs approches de simulation qui ont chacune leurs avantages et leurs inconvénients. Les problématiques rencontrées sont notamment celles de la description discrète de l'interface, de la convergence des schémas utilisés, en particulier du schéma convectif, et de la conservation de l'énergie thermique.

1.1.1 Hypothèses de modélisation dans chaque fluide

Pour la dynamique dans les simulations réalisées, les phénomènes suivants sont considérés pour la dynamique de l'écoulement dans chaque phase :

- L'écoulement est incompressible, la divergence du champ de vitesse est donc nulle.
- La force de viscosité suit la loi de Newton de proportionnalité au tenseur des contraintes.
- Le coefficient de viscosité est constant.
- La gravité s'exerce de manière constante et uniforme.
- La température n'a aucune action sur la dynamique de l'écoulement, donc la masse volumique et les autres propriétés dynamiques sont constantes et homogènes par phase. De tels écoulements présentent l'avantage de ne pas faire dépendre la dynamique de la thermique. Ainsi pour un même écoulement dynamique, selon les propriétés matérielles de la phase des bulles et de la phase liquide, une solution thermique différente est obtenue.

Pour la thermique les hypothèses suivantes sont faites.

- Les transferts conductifs de chaleur suivent la loi de Fourier de proportionnalité au gradient de température.
- Les coefficient de capacité thermique massique et de conductivité thermique sont constants et homogènes par phase, donc indépendants de la température locale.

Les différentes équations dans une phase du fluide sous ces hypothèses s'écrivent :

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \underline{v}_k \cdot \nabla \chi_k = 0 \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \underline{v}_k = 0 \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \rho_k \underline{v}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \underline{v}_k \cdot \underline{v}_k) = -\nabla p_k + \rho_k \underline{g} + \nabla \cdot (\mu_k (\nabla \underline{v}_k + \nabla^\top \underline{v}_k)) \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial \rho_k c_{p_k} T_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k c_{p_k} T_k \underline{v}_k) = \nabla \cdot (\lambda_k \nabla T_k) \quad (1.4)$$

1.1.2 Conditions limites aux interfaces

Pour la dynamique

- la gravité et la différence de masse volumique induisent une poussée d'Archimède,
- la tension de surface est caractérisée par un coefficient de tension de surface σ constant et homogène à la surface des bulles.

Pour la thermique les phénomènes à l'interface sont modélisés de la manière suivante. Cela correspond au cas d'un écoulement eau-air, mais comme le cas industriel visé est l'ébullition, les termes de liquide et vapeur seront employés pour désigner la phase du fluide majoritaire et celle des bulles.

- Il n'y a pas de changement de phase.
- L'interface n'a pas d'énergie thermique interfaciale.

Conséquences

- À cause de la viscosité, il y a continuité de la vitesse tangentielle.
- Comme il n'y a pas de changement de phase, la vitesse normale à l'interface est continue.
- Comme l'écoulement est aussi incompressible, il n'y a pas de changement de volume du liquide simulé dans le domaine.
- Il y a continuité de la température, grâce à l'absence de capacité thermique surface de l'interface.
- Le flux de chaleur est continu dans la direction normale à l'interface.

Ces relations s'écrivent de la manière suivante,

$$\underline{v}_l = \underline{v}_v, \quad (1.5)$$

$$\sum_k \underline{\mathcal{T}}_k \cdot \underline{n}_k = \sigma \kappa \underline{n}_I, \quad (1.6)$$

$$T_l = T_v, \quad (1.7)$$

$$\sum_k \lambda_k \nabla T_k \cdot \underline{n}_k = 0, \quad (1.8)$$

avec $\underline{\mathcal{T}}_k = -\underline{I} p_k + \mu_k (\nabla \underline{v}_k + \nabla^\top \underline{v}_k)$ le tenseur des contraintes, σ le coefficient de tension de surface et $\kappa = \nabla_s \cdot \underline{n}_I$ le rayon de courbure.

1.1.3 La turbulence, les bulles, les sillages

Les phénomènes ayant lieu dans les écoulements à bulles sont multiples. En présence de parois, la phase liquide développe une turbulence de paroi due au cisaillement de l'écoulement. Cette turbulence influence la localisation des bulles, qui en retour influence la turbulence monophasique. Les bulles créent des phénomènes turbulents sans paroi. Les sillages des bulles peuvent être décomposés en une partie moyenne, et une partie fluctuante. Cette fluctuation est elle-même la somme d'une fluctuation naturelle et d'une fluctuation liée aux effets d'essaim, c'est-à-dire des interactions entre les sillages. Cette dynamique complexe a été étudiée en détail par DU CLUZEAU [29], et des modèles ont été proposés suite à l'analyse de SND en essaim avec des bulles fixes et mobiles puis en canal à bulles.

1.2 Stratégies de résolution numériques

1.2.1 Stratégies de maillage

La présence d'interfaces mobiles complique particulièrement la résolution numérique d'un tel problème. La question du maillage, prérequis de toute simulation, est traitée de trois manières différentes. Ces différentes méthodes sont représentées Fig. 1.1.

Maillage adaptatif La première méthode consiste à construire un maillage mobile avec les interfaces. Cette stratégie se retrouve notamment dans le cadre de la simulation de déformation de structures. Elle est cependant peu adaptée aux fluides, et encore moins aux bulles. Il existe une méthode dérivée, qui permet de dépasser quelques limitations, où le maillage ne bouge pas avec le fluide mais s'adapte uniquement à la présence des bulles. Il s'agit de simulation à maillage

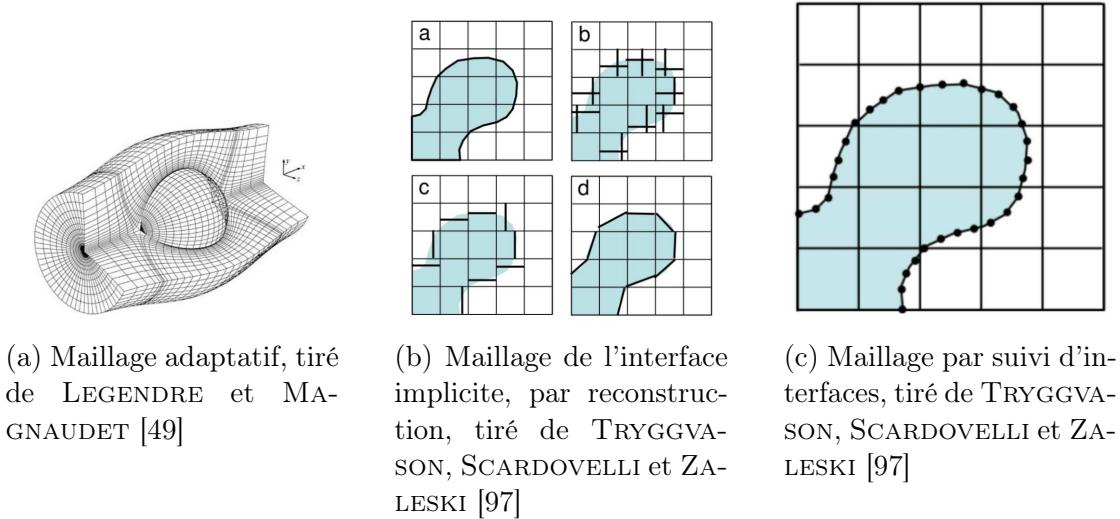


FIGURE 1.1 – Illustration des différentes stratégies de maillage pour la simulation d’écoulements diphasiques avec interface.

adaptatif. Ces déformations de maillages au voisinage des bulles ont l'avantage de pouvoir résoudre plus précisément l'écoulement aux interfaces, mais requiert une grande complexité d'implémentation, de mise en œuvre et de réglage. Elles sont également limitées à des déformations relativement lentes. Elle ne sera pas étudiée dans cette thèse.

Front implicite La deuxième méthode de maillage consiste tout simplement à ne pas prendre en compte par le maillage la présence de la bulle. Il s'agit de la stratégie la plus communément répandue, car la plus simple à implémenter et mettre en œuvre. Elle est dérivée en de multiples variantes, qui tâchent de prendre en compte du mieux qu'elles peuvent la présence d'une discontinuité à l'interface sans la localiser par un maillage. Cette méthode ne sera pas non plus utilisée dans cette thèse, mais certains travaux peuvent néanmoins servir à la mise en place de schéma pour la troisième méthode.

Suivi d'interface (FT) Cette dernière est la méthode utilisée dans TrioCFD-IJK. Le fluide est porté par un maillage fixe, cartésien pour plus de simplicité. Le front d'interface des bulles est suivi par un second maillage, surfacique lagrangien. Les points de ce maillage sont désignés sous la dénomination de marqueurs de l'interface. Ce maillage surfacique interagit avec les champs de vitesse et de pression portés par le maillage Eulérien. Il permet d'exprimer de manière naturelle des discontinuités et des forces interfaciales. En effet, la présence de marqueurs

permet typiquement le calcul précis de la courbure locale de l'interface, nécessaire à la détermination de la force de tension de surface. La présence d'une géométrie d'interface permet aussi le calcul géométrique de la fraction de volume occupée par une phase dans un élément Eulérien. Ce type de méthode demande néanmoins aussi une certaine complexité d'implémentation et de réglage. En effet, afin de garantir une bonne qualité de maillage et éviter la présence d'éléments de tailles disparates, celui-ci doit être remaillé régulièrement. Ce remaillage introduit de légères perturbations à l'interface qu'il convient de stabiliser. Cette méthode n'est pas non plus naturellement conservative du volume de chaque bulle dans le cas incompressible. Le volume doit donc être ajusté à la marge pour éviter des dérives au cours du temps de simulation.

1.2.2 Localisation de l'interface

Les formulations numériques présentées ici sont associées aux deux dernières méthodes de maillage décrites ci-dessus, c'est-à-dire la reconstruction de front et le suivi d'interface. En effet, la première méthode ne nécessite pas de travail particulier pour localiser l'interface vu qu'elle est déjà prise en compte dans le maillage.

VOF La méthode de Volume Of Fluid est certainement la plus répandue dans le domaine de la simulation numérique d'écoulement multi-phasique. La méthode a été mise en place par HIRT et NICHOLS [39]. Elle repose sur la convection numérique d'une fonction indicatrice de phase. Cette fonction prend des valeurs entre 0 et 1 pour matérialiser le taux de présence associé à une phase dans une cellule. Comme la convection de cette indicatrice pose des problèmes de diffusion numérique, des méthodes de reconstruction géométriques de l'interface ont été développées pour garder l'aspect discontinu de l'interface. Cette méthode présente l'avantage, dans le cadre de l'utilisation de schémas de type volume finis, de conserver naturellement les volumes. Différentes versions de cette méthode ont été développées et proposées en autres par MASSONI et al. [59], AGARWAL et al. [1], SINT ANNALAND, DEEN et KUIPERS [79], PALMORE et DESJARDINS [68] et MALAN et al. [57]. Des méthodes de reconstruction d'interface peuvent être mises en place pour pallier la diffusivité numérique de la méthode. La plus répandue est la méthode Piecewise Linear Interface Construction (PLIC) présentée par YOUNGS [101]. Puis des méthodes de reconstruction d'ordre plus élevé sont proposées par SCARDOVELLI et ZALESKI [78] et II et al. [40]. Un benchmark des différentes méthodes de reconstruction est réalisé par AULISA et al. [3].

Level-set La méthode est similaire au volume of fluid. Il s'agit de convecter non pas une indicatrice de phase, mais une distance signée à l'interface. Cette dis-

tance permet ensuite de reconstruire l'interface sous la forme de plan dans chaque cellule, et d'en déduire l'indicatrice de phase. Elle garde davantage d'information que la première sur la localisation de l'interface. En revanche, elle n'est pas naturellement conservative du volume. Elle peut être couplée à la première méthode pour améliorer son caractère conservatif, comme le propose SUSSMAN et al. [81]. D'autres améliorations sont présentées sous l'acronyme Accurate Conservative Level-Set (ACLS) par DESJARDINS, MOUREAU et PITSCH [24] et DESJARDINS et MOUREAU [23]. Des benchmarks des différentes méthodes VOF et level-set sont présentés par TANGUY et al. [85] et BONIOU, SCHMITT et VIÉ [12].

Suivi d'interface Cette méthode consiste à utiliser le maillage Lagrangien pour calculer géométriquement l'indicatrice de phase. Elle a été imaginée par GLIMM et al. [36, 35], puis développée par TRYGGVASON et al. [96] et TRYGGVASON, SCARDOVELLI et ZALESKI [97]. L'information de la position de l'interface est mieux gardée. En effet, le nombre de marqueurs utilisé peut s'adapter à des formes d'interfaces variées et peut excéder le ratio d'un marqueur par cellule. Cependant pour des raisons de stabilité de convection de l'interface lors de l'interpolation de la vitesse du maillage Eulérien au maillage Lagrangien, ce ratio est limité. Le suivi d'interface permet des calculs géométriques précis, mais s'accompagne d'une complexité algorithmique supplémentaire (remaillage) et de quelques problèmes de stabilité.

1.2.3 Discrétisation spatiale

Une fois la forme de maillage choisie et la stratégie pour représenter et localiser le front d'interface, il reste à choisir le traitement des champs Eulériens. Les schémas numériques de convection et de diffusion utilisés dans la suite sont de type volume finis. Ces schémas présente l'avantage de conserver la grandeur intégrée en exprimant les divergences sous forme de flux. Dans le cadre des volumes finis, les champs peuvent être localisés aux faces des cellules ou au centre. Puis suite à un jeu d'interpolation, les valeurs manquantes aux faces ou au centre peuvent être retrouvées.

Schéma colocalisé Dans le cadre de schémas colocalisés, les valeurs qui évoluent, c'est à dire celles qui sont dans la dérivée en temps, sont situées au même endroit que là où sont stockés les informations nécessaires au calcul des flux pour le schéma volume fini.

Schéma décalé Dans un schéma décalé, certaines valeurs sont représentées au centre de mailles et d'autres aux faces. Les valeurs intégrées sont au centre des

mailles, c'est-à-dire la pression, la température, et les grandeurs liées aux flux sont aux faces comme la vitesse d'écoulement, et le gradient de température. Cette discréétisation permet naturellement d'appliquer des schémas de type volumes finis. C'est la configuration qui est implémentée et utilisée dans TrioCFD-IJK, représentée Fig. 1.2.

1.3 Simulation numérique directe de transferts thermiques en écoulements diphasiques dans la littérature

1.3.1 La simulation de transferts de chaleur monophasique

La simulation numérique directe de transferts thermiques commence dans les années 90 avec les calculs de transfert de chaleur en paroi dans des écoulements monophasiques réalisés par exemple par LYONS, HANRATTY et MCLAUGHLIN [54], KAWAMURA, ABE et MATSUO [45] et LAKEHAL et al. [48]. Elle se développe de pair avec la simulation du transport et diffusion d'un scalaire passif, dont elle est très proche, comme celle réalisée par KASAGI, TOMITA et KURODA [43]. Ces simulations se réfèrent à des expériences et parviennent à reproduire assez fidèlement les résultats expérimentaux à des nombres de Reynolds pariétaux donnant des écoulements faiblement turbulents, de l'ordre de 180. La simulation dont nous utiliserons les résultats en tant que référence est celle de KAWAMURA, ABE et MATSUO [45] grâce à la base de données des simulations disponible en ligne [27].

1.3.2 La simulation diphasique

La simulation adiabatique d'écoulements diphasiques apparaît plus tard, avec la profusion de méthodes décrites Sec. 1.2. KAWAMURA et KODAMA [47] mettent ainsi en place la simulation d'une montée de bulle en utilisant une méthode de type suivi d'interface. AGARWAL et al. [1] utilisent une version modifiée de la méthode VOF pour décrire la dynamique d'écoulement du détachement d'une bulle à partir d'un film de vapeur. Puis LU et TRYGGVASON [53] simulent un ensemble de bulles dans un canal avec la méthode front-tracking aussi. Cette configuration est reprise par d'autres, dans des études de la turbulence induite par les bulles, comme CIFANI [17], BOIS et CLUZEAU [7], CLUZEAU [19], HASSLBERGER et al. [38], INNOCENTI et al. [41] et NEMATI et al. [65]. Un autre sujet de recherche important est celui des gouttes et des écoulements où la tension de surface joue un rôle clef, comme le déferlement de vagues. POPINET [72] présente ainsi un code VOF avec une résolution précise de la tension de surface, calculant la courbure

locale à partir d'une fonction de hauteur. BARALDI, DODD et FERRANTE [5] réalise des simulations de gouttes dans un écoulement de turbulence homogène isotrope avec la méthode VOF aussi. La bibliographie réalisée ici n'est pas exhaustive.

1.3.3 La simulation diphasique de transferts thermiques

La littérature fait encore peu état de simulations numériques directes de transferts thermiques en écoulements diphasiques dispersés. Il existe cependant quelques cas réalisés ces dernières années. Dans le domaine des lits fluidisés, des simulations sont réalisées notamment par THIAM [89], THIAM et al. [88], CARBONE, BRAGG et IOVIENO [14] et CHADIL, VINCENT et ESTIVALÈZES [15]. Ces méthodes utilisent une pénalisation de l'équation de Navier-Stokes pour le liquide selon la présence de particules. MA et BOTHE [55] simulent des transferts de chaleur dans un écoulement thermocapillaire, avec une méthode VOF. Il s'agit de l'instabilité de Bénard-Marangoni : dans un domaine fermé en présence d'une interface libre et de bords chauffés à température imposée, des recirculations se créent et donnent des formes particulières à l'interface selon le ratio hauteur largeur de la boite.

TANAKA [83] utilise aussi une méthode VOF pour simuler la montée de bulles dans un canal avec des parois à flux imposés. Il compare ainsi des résultats pour une simulation de bulles, une simulation de gouttes et une simulation monophasique. Il note cependant que les ratios de propriétés utilisés sont faibles, et que les résultats de simulation gagneraient à être mieux convergés. DEEN et KUIPERS [22] utilisent aussi la méthode VOF pour simuler la montée de bulles proche d'une paroi chauffée à température imposée. Ils mesurent ainsi l'effet du passage de la bulle sur le transfert thermique en paroi. Enfin, DABIRI et TRYGGVASON [21] simulent un canal de bulles à différents nombres de Reynolds, différents nombres d'Eötvös et à quelques nombres de Prandtl. Ces simulations sont réalisées avec la méthode de suivi d'interface. C'est cette étude qui nous servira de référence dans le cas de simulation en canal. PIEDRA et al. [71] s'intéressent la même année à l'effet de l'inclinaison du canal sur les transferts thermiques en présence de bulles dans un cas laminaire à $Re_\tau = 49$ et un cas turbulent à $Re_\tau = 150$. Les bulles sont peu déformables, avec une nombre d'Eötvös de 0,31. Plus récemment, un cas test de transfert thermique entre deux gouttes qui coalescent a été réalisé par TALEBANFARD, NEMATI et BOERSMA [82]. PANDA et al. [69] valident un algorithme dit Local Front Reconstruction Method (LFRM) pour une configuration avec une bulle sans écoulement, puis en monophasique dans trois configurations, dans un canal rectangulaire avec les parois à température constante, dans un canal plan avec un écart de température imposé entre les parois, et dans un canal plan avec un flux imposé aux deux parois. Ils l'utilisent ensuite pour réaliser une simulation de canal à bulles, avec une paroi chaude et une paroi froide, à température imposée et en présence de gravité. La résolution des bulles est de 24 mailles par

diamètre, le nombre d’Eötvös est de 2,17, le nombre de Morton de $2,62 \times 10^{-11}$ et le nombre de Prandtl de 1,00. Ils étudient particulièrement l’influence du taux de vide sur les transferts thermiques à la paroi sur une plage de $\alpha \in [2\%, 20\%]$ en jouant sur la hauteur du canal. Le nombre de Reynolds de bulle obtenu dépend du taux de vide de la simulation, ils sont dans une gamme $Re_b \in [500, 800]$. Cependant, les résultats obtenus pour les transferts thermiques sont différents des observations expérimentales de GVOZDIĆ et al. [37] dans une configuration similaire. Selon les auteurs, cette différence est due à l’écart entre la largeur des canaux utilisés expérimentalement et numériquement.

1.4 Monofluide et suivi d’interface dans TrioCFD-IJK

Les méthodes utilisées dans TrioCFD-IJK sont donc le suivi d’interface et des schémas décalés dans le cadre des volumes finis. Cette dualité Euler-Lagrange s’articule notamment autour de la vision monofluide. Le fonctionnement général de TrioCFD-IJK est expliqué dans cette Section, en particulier le traitement des champs thermiques, qui est nouveau. Le schéma en temps utilisé est soit un schéma de type Euler, soit de type RK3. Dans les deux configurations un pas ou sous-pas de temps est calculé de la manière suivante :

- calcul de la dynamique de l’écoulement du pas/sous-pas de temps suivant avec étape de prédiction puis de correction,
- évolution de tous les différents champs thermiques, avec les propriétés monofluides du début du pas de temps,
- déplacement des interfaces, calcul des propriétés monofluides pour le pas ou sous-pas de temps suivant.

Ces sous-étapes sont répétées trois fois dans le cadre du RK3 et appliquées au fur et à mesure aux différents champs dans le cadre de la méthode dite low-storage de WILLIAMSON [100].

1.4.1 Géométrie, conditions aux limites, discréttisation

La géométrie du domaine simulé par TrioCFD-IJK est un pavé droit. Le maillage est hexaédrique et régulier dans chaque direction, d’où le nom IJK. En effet, chaque cellule est identifiée par le triplet d’entier (i, j, k) . Cette simplicité de maillage permet des optimisations dans certains algorithmes, notamment pour la résolution du gradient de pression. Les conditions aux limites sont donc dans chaque direction, sur la face haute et sur la face basse, sur la face de droite et celle de gauche et enfin sur la face du fond et celle de face. Deux configurations seront montrées dans cette thèse, le canal plan dont les faces de gauche et droite sont des parois et toutes les

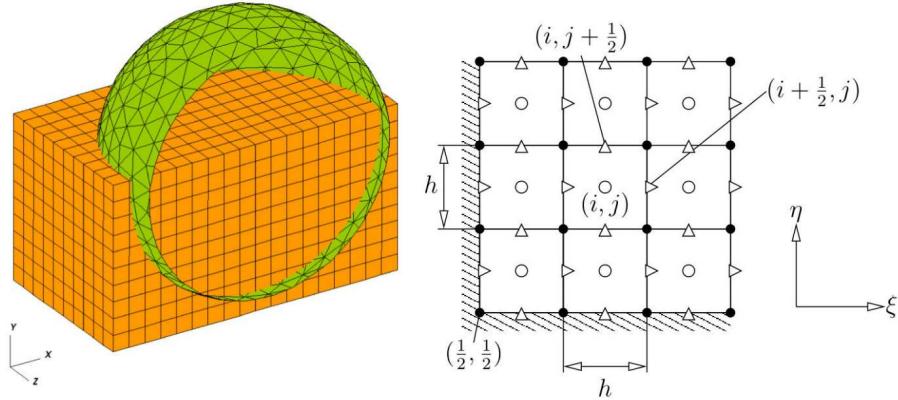


FIGURE 1.2 – Représentation du suivi d'interface par maillage Lagrangien dans une représentation volumique Eulérienne. Localisation des champs sur le maillage Eulérien. La vitesse est aux triangles sur les faces, la pression, l'indicatrice de phase et la température aux cercles au centre des cellules. Les conditions limites sont imposées aux faces des cellules sous la forme de flux. Tiré de BOIS [9].

autres des conditions de périodicité, et l'essaim homogène, où à chaque face est imposée une condition de périodicité avec la face qui lui est en vis-à-vis.

Le code TrioCFD-IJK est parallèle grâce à sa base, la plateforme logicielle TRUST. Le domaine pavé est découpé en blocs et chaque bloc ne connaît les informations de ses blocs voisins que sur quelques cellules d'épaisseur. Ce fonctionnement permet de traiter le calcul de chaque bloc indépendamment jusqu'à l'échange de ces quelques couches de cellules. L'avantage des méthodes locales est qu'elles peuvent être résolues localement et ne nécessitent donc pas la connaissance des valeurs dans tout le domaine. Le traitement d'une simulation d'écoulement est donc naturellement parallélisable dans ce cas, à l'exception du cas de la pression résolue implicitement qui impacte la performance du solveur.

1.4.2 Le suivi d'interface

Le suivi d'interface est central dans cette méthode numérique. Particulièrement complexe, son traitement mérite quelques explications. Des détails supplémentaires peuvent être trouvés dans [9]. Comme précisé précédemment, le maillage de l'interface est constitué de marqueurs, reliés afin de former des triangles. Il s'agit d'un maillage surfacique mobile. Ce maillage évolue selon plusieurs types de contraintes :

- physiques
- et numériques.

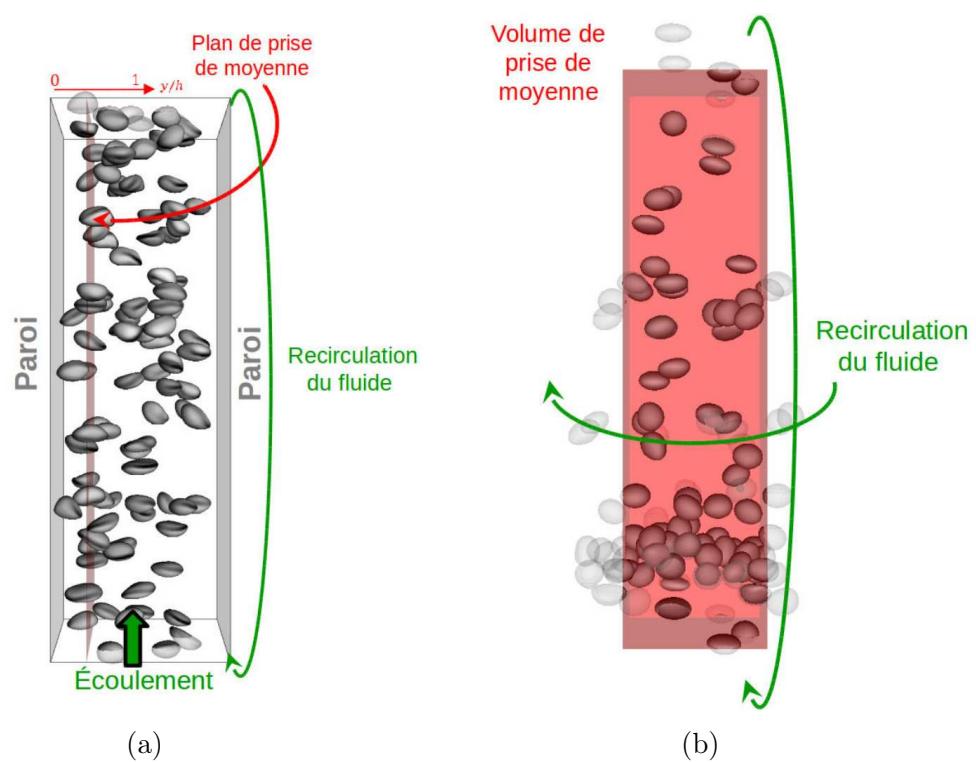


FIGURE 1.3 – Schéma d'un canal 1.3a et d'un essaim 1.3b, tiré de DU CLUZEAU [29].

Dynamique La première catégorie concerne la convection. La vitesse est calculée sur la grille Eulérienne puis interpolée aux marqueurs. Ce calcul de vitesse sur la grille Eulérienne utilise lui-même la géométrie de l'interface. Ainsi la force de flottabilité dépend de la surface d'interface et de sa normale, et la tension de surface de la courbure de l'interface. Lors de la convection par vitesse interpolée, le volume total de la bulle peut dévier légèrement ; une première correction semi-locale du volume est effectuée en déplaçant les marqueurs pour recouvrir un volume cible obtenu par évaluation de la convection d'une fonction couleur comme en VOF. Puis, si une dérive résiduelle est observée, il convient pour respecter la contrainte de conservation de la masse de corriger cette dérive quand elle dépasse un certain seuil. Ainsi dans ce cas, les marqueurs sont déplacés par homothétie à partir du centre de gravité de la bulle afin de retrouver le bon volume.

Conditions aux limites et interactions Les conditions aux limites, contraintes physiques par définition sont aussi prises en compte par les bulles. La présence d'une paroi est prise en compte naturellement par la vitesse de convection qui tend vers zéro dans la direction normale. Cependant cette configuration peut tout de même mener à deux problèmes. Le premier est une sortie de l'interface du domaine par les parois. Pour éviter ce cas, une très faible force normale aux parois lui est appliquée dans la dernière cellule avant la paroi. Le deuxième problème est lié à la capture d'un marqueur dans une zone à vitesse quasi-nulle. Ce marqueur est alors immobile par rapport à la paroi, contrairement au reste de la bulle. Les algorithmes de remaillages et de lissage présentés ci-dessous permettent de résoudre ce cas. Dans le cas où deux bulles sont trop rapprochées, il se peut que la résolution de l'écoulement dans le film ainsi formé ne soit pas suffisante et que les bulles s'interpénètrent. Ce cas est donc similaire à celui des conditions de parois. Il ne conduit pas à un crash de la simulation mais à des incohérences dans certains calculs, comme celui de l'indicatrice. Pour y remédier, une légère force de répulsion est appliquée sur une distance d'environ une diagonale de cellule. Cette force est linéairement croissante dans le liquide à l'approche de l'interface jusqu'à un maximum à l'interface, puis nulle dans la bulle. Enfin la dernière condition aux limites est celle de périodicité. Elle est traitée par la duplication de certaines bulles. Les bulles qui commencent à passer par une face périodique sont dupliquées au niveau de la face en vis-à-vis. Cette duplication est représentée Fig. 1.4.

Stabilité numérique Lors de la convection après interpolation de la vitesse depuis la grille Eulérienne, des instabilités peuvent survenir, menant à une déformation de l'interface. Ces instabilités sont particulièrement marquées quand il y a plus d'un marqueur en moyenne par cellule diphasique. Afin de régler ce problème, un lissage géométrique de l'interface est réalisé régulièrement. Ce lissage est cal-

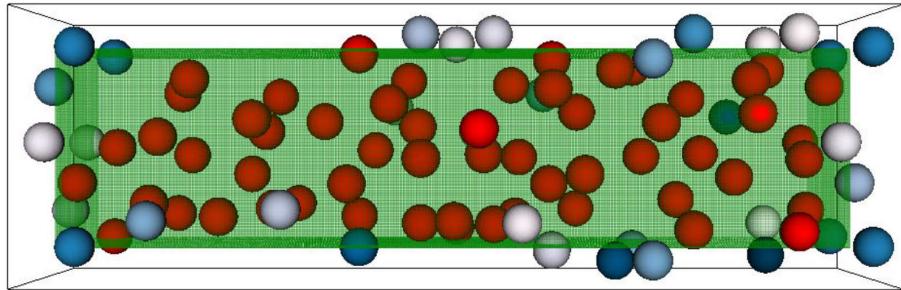


FIGURE 1.4 – Répartition initiales des bulles dans un essaim. Représentation du maillage Eulérien en vert, des bulles en rouges et des bulles fantômes pour la gestion de la périodicité en bleu/gris. Tiré de [29].

culé à partir des marqueurs voisins, et conduit à une légère perte de volume qui est corrigée par la suite. Cette instabilité est cependant stabilisée par les forces de tension de surface. Enfin, comme précisé, il est nécessaire que le ratio de marqueurs par rapport au nombre de cellules diphasiques soit proche de l’unité. Trop grand, l’interface est instable, trop petit, elle est mal résolue et le suivi d’interface perd son intérêt. Pour cela un algorithme de remaillage surface est utilisé. Il garantit une certaine régularité dans la distribution des marqueurs à l’interface.

Calculs géométriques Une fois ces contraintes respectées, le maillage Lagrangien apporte des informations précises et essentielles pour le calcul de la dynamique de l’écoulement aux interfaces. L’intersection entre une cellule hexaédrique et la portion d’interface qui la traverse renseigne sur le volume de chaque phase dans cette cellule, la surface d’interface présente dans cette cellule, la direction normale à l’interface, la courbure moyenne, etc. Toutes ces informations sont calculées géométriquement à chaque instant dans chaque cellule diphasique.

Parallélisme Le calcul parallèle pour les interfaces se matérialise par une répartition du maillage sur chaque bloc de découpage en processus précédemment mentionnés. Ainsi, si un marqueur est localisé dans un certain bloc, il est traité par le processeur associé. De la même manière que pour les variables Eulériennes, le traitement de l’interface est local. Il suffit donc pour traiter un point de connaître ses informations et celles de ses voisins. Il suffit donc de gérer les marqueurs qui sont aux bords de cette découpe (imaginons une bulle à cheval entre deux blocs, et deux marqueurs à sa surface, voisins, l’un sur chaque bloc). Pour cela ces marqueurs voisins localisés en dehors du bloc sont dupliqués, et stockés sous forme de fantômes, dans le processus associé au bloc, puis mis à jour lors des communications entre processus. Les connectivités doivent être maintenues et les intersections

réévaluées.

1.4.3 L'expression monofluide, la dynamique

Le détail des équations présentées ici est pour une grande partie développé dans les livres de MOREL [62] et ISHII et HIBIKI [42]. L'indicatrice de phase est notée χ_k et vaut 1 dans la phase k et 0 à l'extérieur. Dans la description diphasique du système, les variables de l'écoulement dans une phase ne sont pas définies dans l'autre. L'astuce est donc de multiplier toutes ces valeurs par l'indicatrice, définie sur l'ensemble du domaine et nulle dans la partie non définie qui se trouve dans l'autre phase. Ensuite, une variable dite monofluide est définie pour les deux phases, dans l'ensemble du domaine, liquide ou vapeur, comme la somme des variables dans chaque phase, pondérées par l'indicatrice de la phase correspondante.

$$\rho = \sum_k \rho_k \chi_k \quad \nu = \sum_k \nu_k \chi_k \quad \underline{v} = \sum_k \underline{v}_k \chi_k \quad (1.9)$$

$$\lambda = \sum_k \lambda_k \chi_k \quad c_p = \sum_k c_{pk} \chi_k \quad T = \sum_k T_k \chi_k \quad (1.10)$$

...

Les équations diphasiques, valables dans chaque phase indépendamment, peuvent être unifiées par l'utilisation de ces variables monofluides. Ces équations monofluides prennent aussi en compte les conditions à l'interface entre les deux phases. Le détail de l'utilisation de ce formalisme est présenté pour les équations thermiques Sec. 1.5.1.

Les équations monofluides pour la dynamique s'écrivent de la manière suivante :

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial \rho \underline{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{v} \underline{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu (\nabla \underline{v} + \nabla^\top \underline{v})) + \rho \underline{g} - \sigma \kappa \underline{n} \delta_I \quad (1.12)$$

Ces équations sont discrétisées et résolues en volume finis. La forme volume finis de l'équation sur la quantité de mouvement monofluide Éq. (1.12) s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_{dV} \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} dV &= \frac{1}{V} \left(- \oint_S \underline{v} \underline{v} \cdot \underline{n} dS \right. \\ &\quad + \frac{1}{\rho_a} \oint_S (\mu (\nabla \underline{v} + \nabla^\top \underline{v}) + \underline{I} p) \cdot \underline{n} dS \\ &\quad \left. + \int_V \underline{g} dV - \frac{1}{\rho_a} \int_{S_I} \sigma \kappa \underline{n} I dS \right), \end{aligned} \quad (1.13)$$

avec V le volume d'une cellule décalée, S sa surface fermée, ρ_a la masse volumique moyenne sur la cellule décalée et S_I la surface d'interface contenue dans la cellule. Les termes convectif et diffusif sont calculés avec un schéma centré d'ordre respectivement 4 et 2. Le terme de tension de surface est pris en compte géométriquement. Le détail de cette discrétisation se trouve dans DU CLUZEAU [29]. Le gradient de pression est résolu après l'étape de projection par un algorithme itératif et multi-grille, dont les détails sont présentés dans TOUTANT et al. [90]. Finalement, une dérive de la quantité de mouvement peut apparaître dans certaines conditions. Cette dérive, non-physique, est compensée par un terme correctif distribué dans tout le domaine, mis en place par Gabriel RAMIREZ.

1.5 Résolution de l'équation d'énergie thermique

1.5.1 L'équation d'énergie thermique

Passage au monofluide Le passage à l'écriture monofluide se fait à partir de l'expression phasique

$$\frac{\partial \rho_k c_{p_k} T_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k c_{p_k} T_k \underline{v}_k) = \nabla \cdot (\lambda_k \nabla T_k), \quad (1.14)$$

ce qui donne par multiplication par χ_k

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \chi_k \rho_k c_{p_k} T_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\chi_k \rho_k c_{p_k} T_k \underline{v}_k) \\ & - \rho_k c_{p_k} T_k \underbrace{\left(\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \underline{v}_k \cdot \nabla \chi_k \right)}_{=0 \text{ eq transport interface}} \\ & = \nabla \cdot (\chi_k \lambda_k \nabla T_k) \\ & - \lambda_k \nabla T_k \cdot \underbrace{\nabla \chi_k}_{=-\underline{n}_k \delta_I}, \end{aligned} \quad (1.15)$$

puis en sommant sur k , et en appliquant consécutivement la continuité des flux thermiques normaux à l'interface et la continuité de la température :

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_p T \underline{v}) = \nabla \cdot \left(\lambda \sum_k \chi_k \nabla T_k \right) + \underbrace{\sum_k \lambda_k \nabla T_k \cdot \underline{n}_k \delta_I}_{=0 \text{ continuité flux}} \quad (1.16)$$

$$= \nabla \cdot \left(\lambda \nabla T + \underbrace{\lambda \sum_k T_k \underline{n}_k \delta_I}_{=0 \text{ continuité température}} \right), \quad (1.17)$$

et donc :

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_p T \underline{v}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T). \quad (1.18)$$

Cette équation s'écrit encore (en simplifiant $\partial \rho c_p / \partial t + \underline{v} \cdot \nabla (\rho c_p)$) :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T \underline{v}) = \frac{1}{\rho c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T). \quad (1.19)$$

Moyenne harmoniques et arithmétiques D'apparence simple, la complexité diphasique est cachée dans l'Eq. (1.19), mais ressort lors de sa discrétisation. Ainsi, la formation monofluide discrétisée laisse plusieurs possibilités. En notant $I_k = \frac{1}{V} \int_V \chi_k dV$, l'intégrale des différents termes demande une approximation qui s'écrit :

$$\frac{1}{V} \int_V \frac{1}{\rho c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) dV \approx \frac{1}{V} \int_V \frac{1}{\rho c_p} dV \times \frac{1}{V} \oint_S \lambda \nabla T \cdot \underline{n} dS \quad (1.20)$$

$$= \left(\frac{I_l}{\rho c_{p_l}} + \frac{I_v}{\rho c_{p_v}} \right) \times \frac{1}{V} \oint_S \lambda \nabla T \cdot \underline{n} dS \quad (1.21)$$

Dans ce cas-là, la moyenne de ρc_p effective dans la cellule est donc une moyenne harmonique. Mais en écrivant l'équation en énergie, en intégrant puis en passant le ρc_p intégré de l'autre côté, il aurait été aussi naturel d'utiliser un ρc_p arithmétique.

Pour trancher entre ces deux discrétisations, différentes simulations ont été réalisées et sont présentées Sec. 5.1.8. La conclusion est que la moyenne harmonique, présentée en Éq. (1.21) prédit mieux la solution de diffusion pure pour une résolution donnée. Il en est de même pour la moyenne de la conductivité thermique λ . Ce sont donc ces deux moyennes qui sont utilisées dans les simulations présentées.

Discrétisations spatiales La vision monofluide des équations diphasique est ensuite intégrée sur une cellule pour être discrétisée spatialement. Cette intégration

s'écrit :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{V} \int_V T dV \right) = \frac{1}{V} \left(- \int_S T \underline{v} \cdot \underline{n} dS + \frac{1}{\rho c_{ph}} \int_S \lambda_h \nabla T \cdot \underline{n} dS \right). \quad (1.22)$$

La discréétisation donne :

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{1}{V} \left(- \sum_f T_f v_f S_f + \frac{1}{\rho c_{ph_i}} \sum_f (\lambda_h \nabla T)_f \cdot \underline{n}_f S_f \right). \quad (1.23)$$

Dans cette discréétisation, l'indice f dénote que la valeur est discréétisée sur une face et i qu'elle est moyennée sur le volume de la cellule. v_f est déjà connue aux faces, T_f est déterminée à l'aide d'un schéma d'ordre 3 QUICK, $1/\rho c_{ph_i}$ est déterminé géométriquement à partir de I_i l'indicatrice de phase intégrée sur la cellule et $(\lambda_h \nabla T)_f$ est déterminé à partir d'un schéma de différence centré d'ordre 2 :

$$(\lambda_h \nabla T)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{2}{\frac{1}{\lambda_{h_i}} + \frac{1}{\lambda_{h_{i+1}}}} \times \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} \quad (1.24)$$

$$= \lambda_{h_{i+\frac{1}{2}}} \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x}, \quad (1.25)$$

avec $\lambda_{h_{i+\frac{1}{2}}}$ la moyenne harmonique associée à $I_{i+\frac{1}{2}} = \frac{I_i + I_{i+1}}{2}$.

Discréétisation en temps Le schéma en temps de l'évolution des champs de température est soit un Euler explicite, soit un schéma RK3 low-storage. Il est identique, et couplé dans le cas du RK3, au schéma appliqué pour la vitesse. Ainsi dans le cas du schéma d'Euler :

$$\left(\frac{dT_i}{dt} \right)^{(n)} = \frac{1}{V} \left(- \sum_f T_f^{(n)} v_f^{(n)} S_f + \frac{1}{\rho c_{ph_i}} \sum_f \left(\lambda_h^{(n)} \nabla T^{(n)} \right)_f \cdot \underline{n}_f S_f \right) \quad (1.26)$$

et

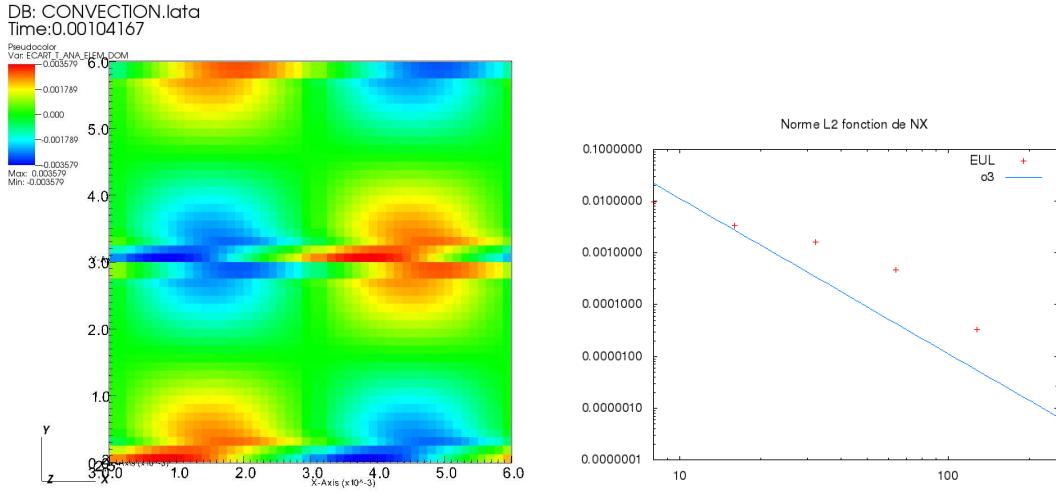
$$T_i^{(n+1)} = T_i^{(n)} + \Delta t \left(\frac{dT_i}{dt} \right)^{(n)} \quad (1.27)$$

1.5.2 La convergence des opérateurs utilisés

Dans cette section, le bon fonctionnement et la pertinence des méthodes utilisées, décrites jusqu'ici sont démontrés. Cette validation numérique est réalisée dans le cas le plus simple possible et vise à vérifier les ordres de convergence des différents schémas. Pour cela une configuration résolue analytiquement est utilisée.

Dans chaque cas d'étude d'un opérateur, les autres opérateurs sont désactivés.

Convection Pour ce cas test, la fonction convectée est la suivante : $T_0(x) = \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \times \cos\left(\frac{2\pi z}{L}\right)$. Les conditions aux limites sont périodiques dans les trois directions. La vitesse de convection est selon la direction y , $v_y = 0,10$, de valeur constante et uniforme. La fonction de température s'écrit donc au cours du temps : $T(x, t) = T_0(x - vt)$. Il est alors possible de résoudre numériquement sur un certain laps de temps la convection de cette fonction de température, puis de regarder l'évolution de l'écart à la solution analytique de référence selon la finesse du maillage utilisé. Le profil de température, comparé à la référence analytique est visible Fig. 1.5a. Il permet de constater l'activation du limiteur du QUICK, conduisant à cette impression de décalage. Ce décalage reste de faible valeur. La convergence en fonction de la taille du maillage est représentée Fig. 1.5b. Cette convergence suit un ordre 3, comme cela était attendu avec le schéma QUICK.



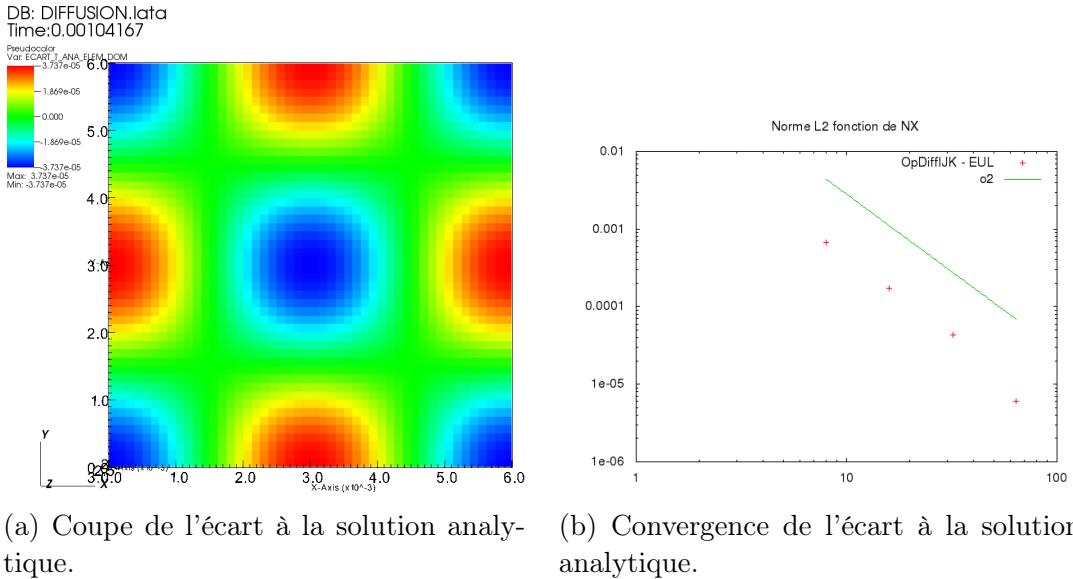
(a) Coupe de l'écart à la solution analytique.

(b) Convergence de l'écart à la solution analytique.

FIGURE 1.5 – Évaluation de l'opérateur de convection, dans un cas sans diffusion.

Diffusion Pour ce cas test, la fonction diffusée est la suivante : $T_0(x) = \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \times \cos\left(\frac{2\pi z}{L}\right)$. Les conditions aux limites sont périodiques dans les trois directions. La vitesse est nulle partout, il n'y a donc pas de phénomènes de convection. Dans cette configuration, une solution analytique est obtenue par séparation des variables : $T(x, t) = f(x) \times g(t) = \frac{1}{2} e^{-\frac{\lambda}{\rho c_p} 2(2\pi/L)^2 t} \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \times \cos\left(\frac{2\pi z}{L}\right)$. Comme dans le premier cas, l'équation est résolue numériquement sur un temps $t = 1,04 \times 10^{-4}$ s pour plusieurs maillages, puis comparée à la solution analytique. Une coupe de l'écart

à la solution analytique est représentée Fig. 1.6a et la convergence en maillage est tracée Fig. 1.6b. Celle-ci suit bien un ordre 2, qui est l'ordre du schéma centré utilisé pour la diffusion.



(a) Coupe de l'écart à la solution analytique.

(b) Convergence de l'écart à la solution analytique.

FIGURE 1.6 – Évaluation de l'opérateur de diffusion, dans un cas sans convection.

Conclusions

Résumé du chapitre

Les différentes catégories de méthodes numériques utilisées dans la littérature sont présentées, afin de mieux placer TrioCFD-IJK, le code utilisé dans cette thèse pour les simulations 3D, dans son cadre et le contexte de la simulation d'écoulements diphasiques. Le code TrioCFD-IJK s'inscrit dans la liste des logiciels de simulation d'écoulements diphasiques à bulles aux échelles fines performants, adaptés à la recherche sur les écoulements à bulles par la réalisation de simulations faisant office d'expérience numérique.

Les méthodes numériques utilisées sont le suivi d'interface, la formulation monofluide et des schémas volumes finis, QUICK ou centrés. Le schéma en temps utilisé est explicite, Euler ou Runge-Kutta d'ordre 3. Le traitement des équations thermiques est réalisé dans le même cadre monofluide. La particularité des écoulements traités est l'indépendance du champ dynamique par rapport à la thermique de l'écoulement. TrioCFD-IJK tire avantageusement partie de cette hypothèse en simulant plusieurs champs thermiques pour un même champ dynamique calculé, et réduisant ainsi fortement le coût de calcul d'un champ thermique.

Enfin, les différents opérateurs utilisés pour la résolution spécifique des champs thermiques sont testés dans des cas simples. La diffusion et la convection sont validées indépendamment. Les ordres de convergence théoriques sont retrouvés, c'est-à-dire 2 pour la diffusion et 3 pour la convection.

Chapitre 2

Étude des transferts thermiques en canaux avec TrioCFD-IJK

Sommaire du présent chapitre

2.1 Présentation du cas du canal	42
2.1.1 Conditions aux limites	42
2.1.2 Changement de variable	42
2.1.3 Nombres adimensionnés	43
2.2 Écoulement moyen	45
2.2.1 La moyenne de Reynolds, une moyenne statistique	45
2.2.2 Application à l'équation diphasique de température	46
2.2.3 Équation moyenne en canal	48
2.3 Le canal de KAWAMURA, monophasique	49
2.3.1 Configuration	49
2.3.2 Étude en maillages	50
2.3.3 Dynamique de l'écoulement	50
2.3.4 Profil de température	52
2.3.5 Statistiques de fluctuations vitesse-température	55
2.3.6 Nombre de Nusselt pariétal	57
2.4 Le canal de DABIRI, diphasique à bulles	57
2.4.1 Configuration	57
2.4.2 La dynamique de l'écoulement à bulles en canal	60
2.4.3 Profil moyen des statistiques de température	62
2.4.4 Statistiques des fluctuations vitesse-température	65
2.4.5 Nombre de Nusselt de canal	68

Conclusions
70

Dans ce chapitre, deux études en canal sont menées. En premier lieu, une étude monophasique, qui vise à montrer la performance de la résolution monophasique d'un champ thermique en canal. Cette simulation est comparée à une simulation classique de la littérature, celle de KAWAMURA, ABE et MATSUO [45]. Si les résultats pour des transferts thermiques dans les écoulements à bulles sont rares, ce n'est pas le cas dans la configuration monophasique. Puis une configuration avec des bulles est présentée. Elle est comparée à l'étude de DABIRI et TRYGGVASON [21], qui est à notre connaissance la seule simulation DNS des transferts thermiques réalisée sur un canal plan avec plusieurs bulles en suivi d'interface.

2.1 Présentation du cas du canal

2.1.1 Conditions aux limites

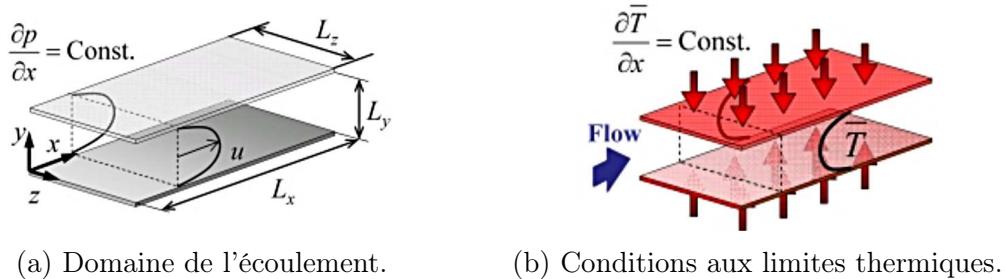


FIGURE 2.1 – Conditions aux limites dans le cas du canal, tiré de [45].

La simulation d'un canal est réalisée dans un domaine géométrique de la forme d'un pavé droit. Deux parois sont placées face à face. Elles présentent des conditions limites de non-glissement. Les autres faces sont associées à des conditions de périodicité. Une valeur de flux thermique q_w est imposée aux parois. Il est à noter que cette condition est légèrement différente de celle utilisée par KAWAMURA qui impose non pas le flux thermique local, mais le flux thermique moyen.

2.1.2 Changement de variable

Dans les cas monophasique et diphasique, un changement de variable est effectué pour éliminer l'évolution de la température le long du canal et réaliser des statistiques le long de l'écoulement :

$$\theta = \frac{dT_m}{dx}x - T, \quad (2.1)$$

avec $T_m = 2q_w / \int_0^{2\delta} \langle \rho c_p u \rangle dy$, où u est la vitesse dans la direction axiale (x) et $\langle \cdot \rangle$ désigne une moyenne temporelle et dans le plan (x, z), selon les directions d'homogénéité (y est la direction normale aux parois). Dans le cas diphasique, ces valeurs sont monofluide. Ce changement de variable donne dans l'équation de convection-diffusion de la température :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \cdot (\theta \underline{v}) + \nabla \cdot \left(\frac{dT_m}{dx} x \underline{v} \right) + \frac{\lambda}{\rho c_p} \nabla \cdot \left(\nabla \theta - \nabla \left(\frac{dT_m}{dx} x \right) \right) \quad (2.2)$$

$$= -\nabla \cdot (\theta \underline{v}) + \frac{dT_m}{dx} \underline{v}_x + \frac{\lambda}{\rho c_p} \nabla \cdot (\nabla \theta) \quad (2.3)$$

Il y a donc un terme supplémentaire dans cette équation par rapport à l'équation classique de la température. Ce terme sera désigné sous le nom de terme source, mais il ne s'agit pas d'une source mise en place pour représenter un phénomène, il vient purement du changement de variable.

2.1.3 Nombres adimensionnés

Pour la dynamique Dans un canal, il existe deux distances pertinentes pour adimensionner les différentes variables. La première est simplement la demi-largeur du canal δ . La deuxième est déduite de la contrainte pariétale $\tau_w = \mu \partial u / \partial y|_0$. Cette contrainte permet de définir une vitesse pariétale $u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho_l}$, puis un nombre de Reynolds pariétal $Re_\tau = \rho_l u_\tau \delta / \mu_l$ et enfin la distance pariétale $y_\tau = \delta / Re_\tau$. C'est cette deuxième distance qui permet d'obtenir une loi d'abord linéaire en paroi puis logarithmique universelle, quel que soit le nombre de Reynolds de l'écoulement. L'inverse de la pente de cette loi logarithmique est appelée constante de Von Kármán, notée κ et qui vaut à peu près 0,41.

Dynamique des bulles La dynamique des bulles dépend fortement de leur déformabilité. Cette déformabilité se caractérise par le nombre d'Eötvös, qui représente le rapport entre la force de flottabilité et la force de tension de surface. Ainsi le nombre d'Eötvös s'écrit,

$$Eo = \frac{\Delta \rho g D_b^2}{\sigma}, \quad (2.4)$$

avec $\Delta \rho = \rho_l - \rho_g$ la différence entre les deux masses volumiques. Plus le nombre d'Eötvös est élevé et plus les bulles sont déformables. La dynamique des bulles se caractérise aussi par le nombre d'Archimède, qui caractérise le ratio entre la force

de gravité et la force de viscosité,

$$Ar = \frac{gD_b^3}{\nu_l^2}, \quad (2.5)$$

ou bien par le nombre de Reynolds de bulle,

$$Re_b = \frac{\rho_l(\bar{u}^v - \bar{u}^l)D_b}{\mu_l}, \quad (2.6)$$

construit à partir de la différence de vitesse entre la phase liquide et la phase vapeur. Contrairement au nombre d'Archimède, celui-ci n'est pas connu à partir des paramètres de simulation ; il nécessite les résultats de la simulation.

Pour la thermique Pour la température, il existe aussi un adimensionnement avec la distance de la demi-largeur du canal. Et un second est défini à partir de la distance correspondant à la distance partiétale y_τ , divisée par le nombre de Prandtl. La température d'adimensionnement T_τ est définie selon les conditions en paroi soit comme la température imposée en paroi, soit à partir du flux imposé en paroi. C'est ce deuxième cas qui nous intéresse ici et donc $T_\tau = q_w / (\rho_l c_{p,l} u_\tau)$. Cette température permet de retrouver une loi linéaire proche paroi puis logarithmique loin de la paroi, similaire à la loi observée sur la vitesse moyenne axiale. Un autre adimensionnement peut-être fait sans avoir recours à la vitesse pariétal, il utilise $T^* = q_w \delta / \lambda_l$. Les équations de convection-diffusion de la température adimensionnée font apparaître un autre nombre adimensionné, le nombre de Prandtl multiplié par le nombre de Reynolds, qui correspond au rapport entre le terme de convection et le terme de diffusion de la température. Le nombre de Prandlt s'écrit :

$$Pr_l = \frac{\mu}{\lambda c_p}. \quad (2.7)$$

Le nombre de Nusselt est défini dans le cas du canal avec flux imposé aux parois de la manière suivante :

$$Nu = \frac{2}{\theta_m^*}, \quad (2.8)$$

avec

$$\theta_m^* = \frac{\int_0^{2\delta} \langle \rho c_p u \theta / T^* \rangle dy}{\int_0^{2\delta} \langle \rho c_p u \rangle dy}. \quad (2.9)$$

2.2 Écoulement moyen

Afin d'étudier les écoulements turbulents, nous avons recours à la moyenne de Reynolds. Celle-ci permet de décomposer chaque variable en une partie moyenne, et une partie fluctuante. L'hypothèse d'ergodicité est faite, aussi cette moyenne pourra aussi bien être calculée statistiquement, que temporellement dans un cas statistiquement stationnaire, ou spatialement dans une direction statistiquement homogène.

2.2.1 La moyenne de Reynolds, une moyenne statistique

Les notations suivantes seront utilisées :

- la moyenne au sens statistique (moyenne d'un grand nombre d'expériences avec les mêmes conditions initiales expérimentales) : \bar{a}
- la moyenne spatiale dans les dimensions d'homogénéité : \bar{a}^X
- la moyenne temporelle d'un champ statistiquement stationnaire : \bar{a}^t
- la moyenne par phase : $\bar{a}_k^k \equiv \frac{\bar{a}_k \chi_k}{\chi_k}$ cette fois-ci, la moyenne se fait en temps et dans les directions d'homogénéité. La moyenne de l'indicatrice de phase est notée $\bar{\chi}_k \equiv \alpha_k$.

La moyenne par phase est une application linéaire, ainsi

$$\overline{a_k + b_k}^k = \bar{a}_k^k + \bar{b}_k^k \quad (2.10)$$

$$\overline{ca_k + d}^k = c\bar{a}_k^k + d, \quad (2.11)$$

avec a_k et b_k deux variables et c et d deux constantes. De plus on a aussi l'idempotence :

$$\overline{\bar{a}_k^k}^k = \bar{a}_k^k. \quad (2.12)$$

Les propriétés classiques de la moyenne de Reynolds monophasique sont donc retrouvées pour la moyenne par phase. De la même manière, on définit le pendant de la fluctuation monophasique, la fluctuation par phase. Celle-ci est telle que :

$$a_k = \bar{a}_k^k + a'_k, \quad (2.13)$$

avec a_k une variable quelconque et a'_k la fluctuation de a_k . Les fluctuations moyennes sont nulles, donc $\overline{a'_k}^k = 0$. La moyenne d'un produit de deux variables a_k et b_k donne

donc,

$$\overline{a_k b_k}^k = \overline{(\overline{a_k}^k + a'_k) \times (\overline{b_k}^k + b'_k)}^k \quad (2.14)$$

$$= \overline{\overline{a_k}^k \overline{b_k}^k} + a'_k \overline{b_k}^k + b'_k \overline{a_k}^k + a'_k b'_k \quad (2.15)$$

$$= \overline{a_k}^k \overline{b_k}^k + \overline{a'_k b'_k}^k. \quad (2.16)$$

2.2.2 Application à l'équation diphasique de température

Avant d'appliquer la moyenne de Reynolds à l'équation de la température, l'opération est réalisée au préalable sur les équations de transport de l'interface et de conservation de la masse Éqs. (1.1) et (1.2). Cela donne pour le transport de l'interface :

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \overline{\underline{v}_k \cdot \nabla \chi_k} = 0, \quad (2.17)$$

avec $\nabla \chi_k = -\underline{n}_k \delta_I$. Et dans notre cadre incompressible, cela conduit pour la conservation de la masse à :

$$\overline{\chi_k \nabla \cdot \underline{v}_k} = 0 \quad (2.18)$$

$$-\overline{\underline{v}_k \cdot \nabla \chi_k} + \nabla \cdot (\overline{\chi_k \underline{v}_k}) = 0 \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \overline{\underline{v}_k}^k) = 0. \quad (2.20)$$

Une équation diphasique de température valable dans tout le domaine Éq. (2.22) est obtenue en multipliant l'équation monophasique Éq. (2.21), valable uniquement dans la phase k considérée par l'indicatrice de phase.

$$\frac{\partial \rho_k c_{p_k} T_k}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_k c_{p_k} T_k \underline{v}_k) + \nabla \cdot (\lambda_k \nabla T_k), \quad \forall \mathbf{x} \in \text{Phase}_k(t) \quad (2.21)$$

$$\chi_k \frac{\partial \rho_k c_{p_k} T_k}{\partial t} = -\chi_k \nabla \cdot (\rho_k c_{p_k} T_k \underline{v}_k) + \chi_k \nabla \cdot (\lambda_k \nabla T_k), \quad \forall \mathbf{x} \in \text{Domaine}. \quad (2.22)$$

La moyenne de Reynolds est appliquée à l'Éq. (2.22) donnant l'Éq. (2.23), puis les indicatrices sont passées sous les dérivées Éq. (2.24). L'équation de transport de l'interface Éq. (1.1) permet de simplifier quelques termes, et les moyennes de

Reynolds sont transformées en moyennes de phase Éq. (2.25).

$$\overline{\chi_k \frac{\partial \rho_k c_{p_k} T_k}{\partial t}} = -\overline{\chi_k \nabla \cdot (\rho_k c_{p_k} T_k \underline{v}_k)} + \overline{\chi_k \nabla \cdot (\lambda_k \nabla T_k)} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\partial \chi_k \rho_k c_{p_k} T_k}{\partial t}} - \rho_k c_{p_k} T_k \overline{\frac{\partial \chi_k}{\partial t}} &= -\overline{\nabla \cdot (\chi_k \rho_k c_{p_k} T_k \underline{v}_k)} + \overline{\rho_k c_{p_k} T_k \underline{v}_k \cdot \nabla \chi_k} \\ &\quad + \overline{\nabla \cdot (\chi_k \lambda_k \nabla T_k)} - \overline{\lambda_k \nabla T_k \cdot \nabla \chi_k} \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k \overline{T}^k}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\alpha_k \overline{T}^k \underline{v}) \\ &\quad + \frac{1}{\rho_k c_{p_k}} \left(\lambda_k \nabla \cdot (\nabla (\overline{\chi_k T_k}) - \overline{T_k \nabla \chi_k}) - \overline{\underline{q}_k \cdot \underline{n}_k \delta_I} \right), \end{aligned} \quad (2.25)$$

avec $\underline{q}_k = -\lambda_k \nabla T_k$ et en utilisant des propriétés $\rho_k c_{p_k}$ et λ_k constantes par phase. Puis le gradient de température est développé de sorte à retrouver seulement des variables moyennes par phase, $\nabla(\overline{\chi_k T_k}) = \nabla(\alpha_k \overline{T_k}^k) = \alpha_k \nabla \overline{T_k}^k + \overline{T_k}^k \nabla \alpha_k$. C'est ainsi qu'est obtenue l'équation Euler-Euler de la température dans le cas général diphasique Éq. (2.26), selon les hypothèses présentées au Chap. 1.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k \overline{T}^k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \overline{T}^k \underline{v}^k) &= -\nabla \cdot (\alpha_k \overline{T'} \underline{v}'^k) + \frac{\lambda_k}{\rho_k c_{p_k}} \nabla \cdot (\alpha_k \nabla \overline{T}^k) \\ &\quad - \frac{\lambda_k}{\rho_k c_{p_k}} \nabla \cdot (\overline{T_k \nabla \chi_k} - \overline{T}^k \nabla \alpha_k) \\ &\quad - \frac{1}{\rho_k c_{p_k}} \overline{\underline{q}_k \cdot \underline{n}_k \delta_I} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Dans cette équation, 3 termes ne sont pas fermés :

- la moyenne du vecteur normal à l'interface des bulles pondéré par la température $\overline{T_k \nabla \chi_k} = -\overline{T_I \underline{n}_k \delta_I}$,
- la moyenne du flux interfacial normal, $\overline{\underline{q}_k \cdot \underline{n}_k \delta_I}$,
- et le flux thermique turbulent, $\underline{J}_k^T = \overline{T' \underline{v}'^k}$.

Usuellement seuls les deux derniers termes sont fermés, il n'existe pas à notre connaissance de travaux sur le premier. Dans le cadre de l'ébullition, la relation thermodynamique à l'équilibre conduit à $T_I = T_{sat}$. Si l'on suppose la température de saturation constante, cela conduit à un terme $(T_{sat} - \overline{T}^k) \nabla \alpha_k$ qui est fermé (mais jamais vu à notre connaissance dans les codes moyennés). Le flux thermique turbulent est fermé avec un modèle de nombre de Prandtl turbulent, $\overline{T' \underline{v}'^k} = \frac{1}{Pr^T} \frac{\overline{u' v'^k}}{d \overline{u}^k / dy} \frac{d \overline{T}^k}{dy}$ ([46]), et le flux interfacial normal à partir d'un modèle de nombre de Nusselt, $Nu = f(Re, Pr, \alpha_k, \dots)$.

Une équation portant sur le flux thermique turbulent \underline{J}_k^T peut être obtenue

comme pour l'équation sur $\overline{u'_i u'_j}^k$. Son obtention est décrite par MOREL [62] en Éq. (6.90).

$$\frac{\partial \alpha_k J_{k,i}^T}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_k J_{k,i}^T \overline{v_j}^k}{\partial x_j} = -\alpha_k J_{k,j}^T \frac{\partial \overline{v_i}^k}{\partial x_j} - \alpha_k R_{k,ij} \frac{\partial \overline{T}^k}{\partial x_j} - \frac{\partial \alpha_k \overline{T' v'_i v'_j}^k}{\partial x_j} - \alpha_k \frac{\overline{T'} \frac{\partial p'}{\partial x_i}^k}{\rho_k} + \alpha_k \nu_k T' \frac{\partial^2 \overline{v'_i}^k}{\partial x_j^2} + \alpha_k v'_i \frac{\partial^2 \overline{T'}^k}{\partial x_j^2}, \quad (2.27)$$

avec $R_{k,ij} = \overline{v'_i v'_j}^k$. Cette fois-ci, les 4 derniers termes de l'équation demandent une fermeture supplémentaire, mais il n'y a pas de termes interfaciaux qui interviennent. En revanche, il y a des statistiques d'ordre 3, coûteuses à faire converger dans une simulation numérique diphasique.

2.2.3 L'équation moyennée de la température dans le cas du canal

Dans le cas du canal, les directions x et z sont des directions statistiquement homogènes. Ainsi les dérivées selon ces directions de variables moyennes sont nulles. De plus, le terme source permettant de retirer l'énergie thermique injectée aux parois équilibre la solution au cours du temps, qui est donc aussi statistiquement stationnaire. Ainsi les dérivées en temps de grandeurs moyennes sont nulles. L'équation Euler-Euler de la température Éq. (2.26) devient donc avec le changement de variable présenté Éq. (2.1) :

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_k \overline{\theta}^k \overline{v_y}^k}{dy} &= -\frac{d\alpha_k \overline{\theta'} v'_y}{dy} + \frac{\lambda_k}{\rho_k c_{p_k}} \frac{d\alpha_k d\overline{\theta}^k / dy}{dy} \\ &\quad - \frac{\lambda_k}{\rho_k c_{p_k}} \frac{d}{dy} \left(-\overline{\theta_k} \underline{n}_k \cdot \underline{e}_y \delta_I - \overline{\theta}^k \frac{d\alpha_k}{dy} \right) \\ &\quad + \frac{1}{\rho_k c_{p_k}} \overline{\lambda_k \nabla \theta_k \cdot \underline{n}_k \delta_I} + \frac{dT_m}{dx} \alpha_k \overline{v_x}^k \underline{e}_x. \end{aligned} \quad (2.28)$$

avec \underline{e} le vecteur unitaire. Avec la conservation de la masse et l'incompressibilité, on a aussi sur la vitesse :

$$\nabla \cdot (\underline{v}_k) = 0, \quad (2.29)$$

ainsi qu'en moyenne,

$$\nabla \cdot (\alpha_k \overline{v}_k^k) = 0 \quad (2.30)$$

et en prenant en compte les caractéristiques du cas du canal,

$$\frac{d\alpha_k \bar{v}_y^k}{dy} = 0. \quad (2.31)$$

Or en paroi la vitesse normale est nulle,

$$\alpha_k \bar{v}_y^k|_0 = 0, \quad (2.32)$$

donc,

$$\alpha_k \bar{v}_y^k(y) = 0. \quad (2.33)$$

Cela donne pour l'équation Euler-Euler Éq. (2.28)

$$\begin{aligned} 0 = & -\frac{d\alpha_k \bar{\theta}' v_y' k}{dy} + \frac{\lambda_k}{\rho_k c_{p_k}} \frac{d\alpha_k d\bar{\theta}^k / dy}{dy} \\ & - \frac{\lambda_k}{\rho_k c_{p_k}} \frac{d}{dy} \left(-\bar{\theta}_k \underline{n}_k \cdot \underline{e}_y \delta_I - \bar{\theta}^k \frac{d\alpha_k}{dy} \right) \\ & + \frac{1}{\rho_k c_{p_k}} \overline{\lambda_k \nabla \theta_k \cdot \underline{n}_k \delta_I} + \frac{dT_m}{dx} \alpha_k \bar{v}_x^k \underline{e}_x. \end{aligned} \quad (2.34)$$

2.3 Le canal de KAWAMURA, monophasique

Le calcul d'un écoulement dans un canal monophasique, déjà mis en place dans la littérature répond à plusieurs besoins. Le premier est d'avoir un cas test sur un cas turbulent pour évaluer le code TrioCFD-IJK pour la résolution de l'équation de l'énergie thermique en canal. Le deuxième est de pouvoir comparer les résultats obtenus à des résultats de la littérature pour s'assurer de l'absence d'erreur impactant la résolution monophasique. Par simplicité, la température dans le canal est notée T plutôt que θ dans les équations suivantes. Cependant, il s'agit bien d'une température statistiquement stationnaire, le puit d'énergie thermique présenté en Éq. (2.1) est bien présent.

2.3.1 Configuration

Dans ce cas, il n'y a pas de bulle, il n'y a donc qu'une seule phase, la phase liquide. Les paramètres physiques de la simulation sont présentés Tab. 2.1. Ils ont été choisis identiques à ceux utilisés par KAWAMURA, ABE et MATSUO [45].

L_x	m	$\pi \times 10^{-2}$
L_y	m	$1,00 \times 10^{-2}$
L_z	m	$\pi/2 \times 10^{-2}$
ρ	kg m^{-3}	$5,94 \times 10^2$
μ	Pas	$6,83 \times 10^{-5}$
Re_τ	—	180
Pr_l	—	1,00

TABLEAU 2.1 – Paramètres dynamiques utilisés pour les simulations en canal monophasique.

2.3.2 Étude en maillages

La simulation est lancée sur trois maillages pour évaluer la convergence des résultats obtenus. Les trois maillages sont décrits Tab. 2.2. Le y^+ renseigné correspond à la distance du premier centre de cellule à la paroi. Le temps de prise de

n°	Maillage	N_x	N_y	N_z	N_{tot}	y^+	Δt_{stats}^*
0	grossier	192	576	96	$10,6 \times 10^6$	0,31	12,85
1	fin	384	1152	192	$84,9 \times 10^6$	0,15	3,93
2	très fin	576	1728	288	$286,7 \times 10^6$	0,10	0,81

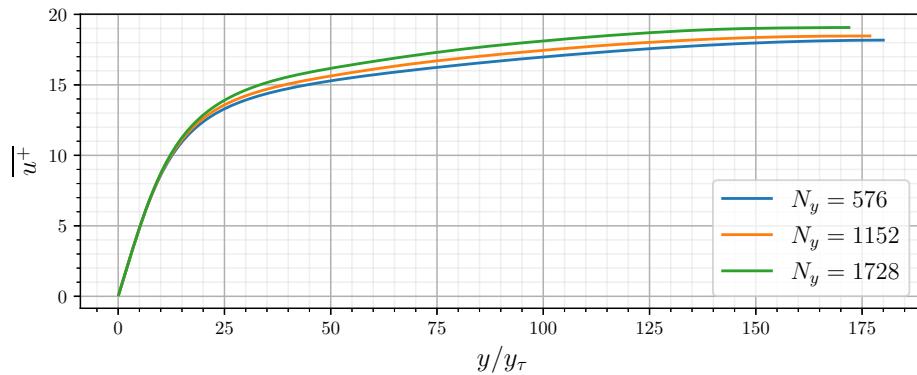
TABLEAU 2.2 – Maillages mis en place pour la convergence en maillage.

statistiques est noté Δt_{stats}^* . t^* est obtenu en adimensionnant le temps physique de simulation avec $t_\tau = \delta/u_\tau$.

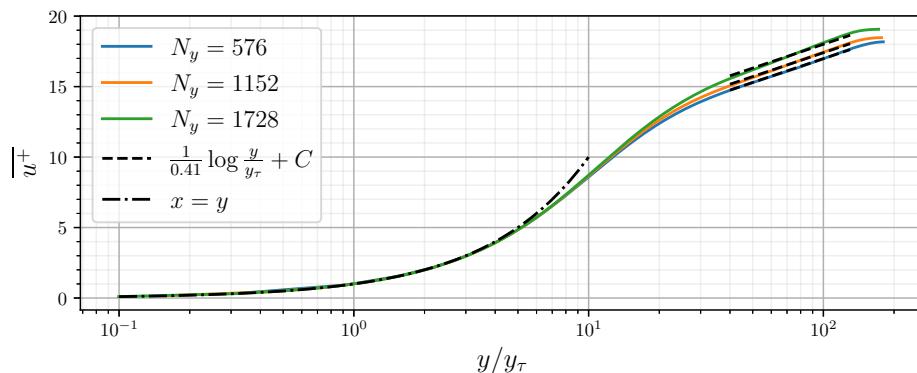
2.3.3 Dynamique de l'écoulement

L'étude en maillage révèle que pour ces trois simulations les statistiques de vitesse axiale et du produit des fluctuations de vitesse axiale sont convergées. En effet, les Figs. 2.2 et 2.3 montrent que pour les trois maillages, les courbes sont quasiment superposées. La Fig. 2.2b permet d'observer la loi linéaire proche paroi puis la loi logarithmique universelle loin de la paroi. Cette loi suit une pente en $1/\kappa$ avec $\kappa = 0,41$ la constante de Von Kármán.

Les valeurs du produit des fluctuations des différentes composantes de la vitesse sont tracées Figs. 2.3 et 2.4. Les profils correspondent à ce qui est attendu et les trois courbes ne présentent pas de différences majeures. Toutefois, la simulation la plus fine semble avoir des statistiques moins bien convergées que celles des deux autres simulations (cf. Tab. 2.2). Cela provient du temps plus faible de prise



(a) En échelle linéaire.



(b) En échelle logarithmique.

FIGURE 2.2 – Profil de vitesse moyenne axiale dans le canal plan.

de statistiques, dû au coût important du calcul. Ce coût est lui-même lié aux limitations du code, qui n'est pas adapté à un maillage fin en paroi car il est uniforme par direction. Ainsi, un maillage fin en paroi impose un maillage fin de tout le canal dans la direction considérée. Ce choix d'implémentation vient de l'absence de besoin de construire un maillage non-uniforme en présence de bulles, cœur de l'objectif de TrioCFD-IJK.

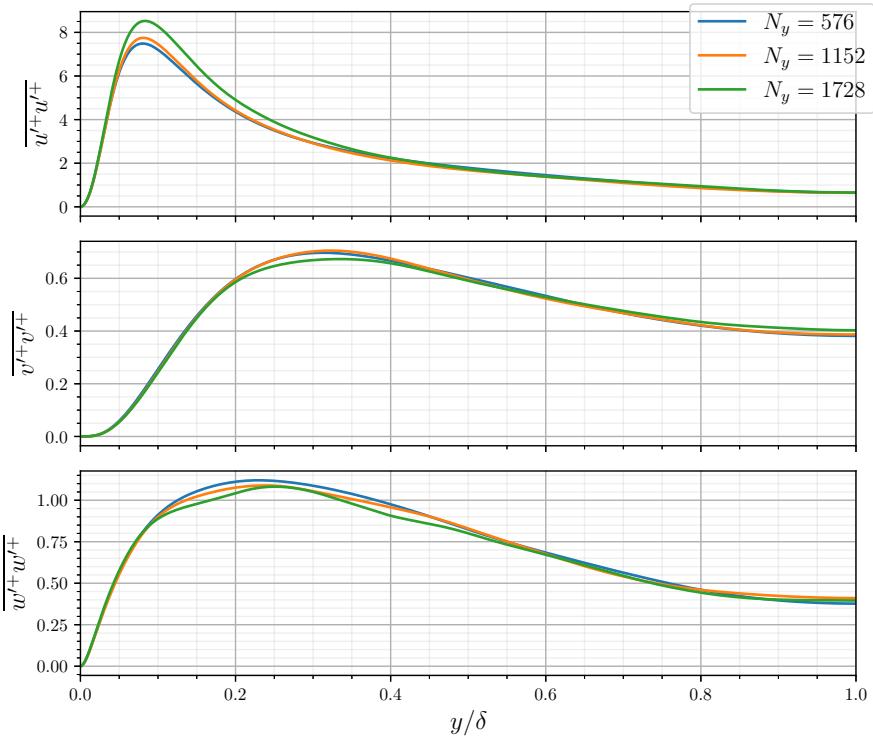


FIGURE 2.3 – Profil de la moyenne du carré des fluctuations de vitesses.

2.3.4 Profil de température

Dans ce cadre là, l'adimensionnement de la température proposé par KAWAMURA est le suivant :

$$T^+ = \frac{T \rho c_p u_\tau}{q_w}, \quad (2.35)$$

avec $u_\tau = \sqrt{\nu_l \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_0}$ la vitesse caractéristique de cisaillement. $y_\tau = \delta / Re_\tau$ désigne la distance à la paroi adimensionnée, avec δ la demi distance entre les parois et Re_τ le nombre de Reynolds pariétal de l'écoulement. Cela donne la distance adimen-

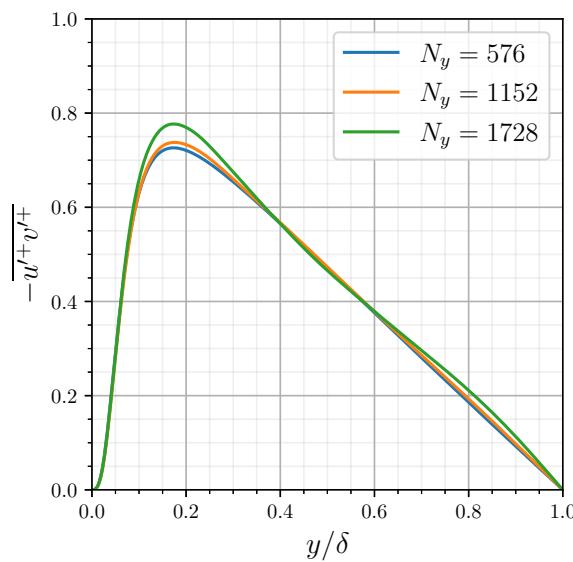


FIGURE 2.4 – Profil de la moyenne du produit des fluctuations de la vitesse axiale et normale aux parois.

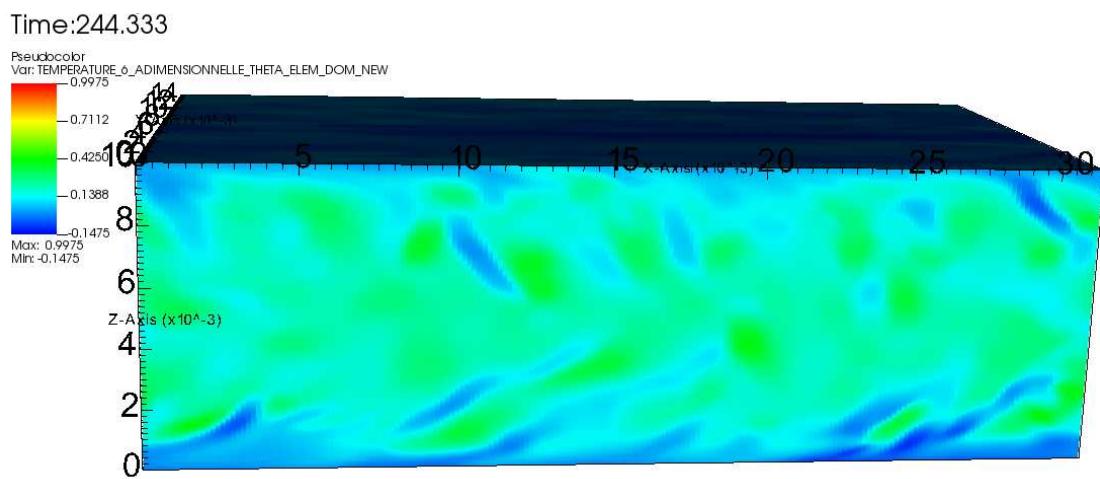


FIGURE 2.5 – Température dans le canal de Kawamura, vue perpendiculaire aux parois et au sens de l'écoulement.

sionnée

$$y^+ = \frac{y}{y_\tau}. \quad (2.36)$$

Les données de référence de KAWAMURA accessibles dans la base de données <https://www.rs.tus.ac.jp/t2lab/db/poi/poi.html>. Le profil de température, adimensionné, est représenté dans le canal Fig. 2.5. Les parois sont respectivement les faces en haut et en bas du pavé. L'écoulement va gauche à droite. L'écoulement forme des stries de température aux parois, comme cela se retrouve dans l'article de DABIRI et TRYGGVASON [21] par exemple. Perpendiculairement aux parois, on voit bien des structures turbulentes. Ces définitions donnent :

$$\left. \frac{d\bar{T}^+}{dy^+} \right|_0 = \frac{1}{Pr_l}. \quad (2.37)$$

Cette valeur est bien retrouvée sur la Fig. 2.6 proche de $y^+ = 0,00$, la pente est de 1,00. Cette figure montre aussi la convergence de la solution obtenue avec TrioCFD-IJK vers la solution numérique de KAWAMURA, qui se superposent parfaitement pour le maillage le plus fin. Ce profil de température dans le canal est représenté

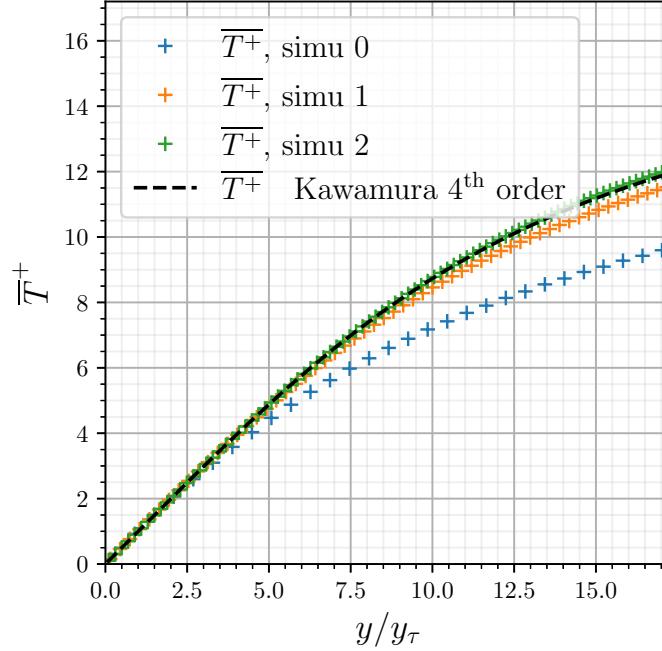


FIGURE 2.6 – Profil proche paroi de \bar{T}^+ comparé à la simulation de Kawamura.

complètement Fig. 2.7 dans différentes échelles. La visualisation en échelle loga-

rithmique permet de retrouver une relation affine en $\log y^+$. La pente observée est proche du coefficient $1/0,43$ obtenu par KAWAMURA, mais la différence est tout de même visible. Cette différence provient probablement d'une résolution numérique différente au centre du canal et d'un temps de prise de statistiques un peu court ($\approx 0,80$ unités de temps adimensionné).

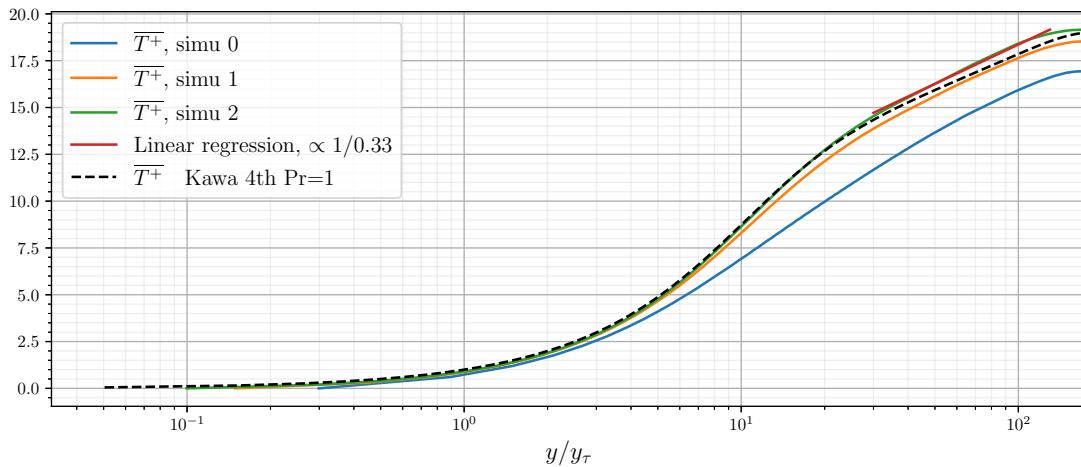


FIGURE 2.7 – Convergence en maillage du profil de température selon l’axe normal aux parois en échelle logarithmique.

2.3.5 Statistiques de fluctuations vitesse-température

Le profil des fluctuations vitesse température dans la direction de l’écoulement diffère en paroi entre les simulation comme le montre la Fig. 2.8. Cette différence est due aux différentes conditions aux limites entre les simulations, celle de TrioCFD-IJK utilisant un flux constant imposé, et celle de KAWAMURA un flux moyen constant. Cela change aussi la valeur du pic proche paroi et décale aussi légèrement le maximum plus proche de 0,00. Cependant au centre du canal les deux simulations se rejoignent, les effets proche paroi étant atténués. Il en est de même pour la fluctuation $\overline{v'^+T'^+}$ représentée aussi Fig. 2.8. La fluctuation $\overline{w'T'}$ n'est pas représentée car elle est négligeable dans cette direction d'homogénéité. Il y a de faibles différences entre les deux simulations les plus fines et les résultats sont très similaires à ceux obtenus par Kawamura, ce qui permet de valider nos schémas de résolution spatiaux et temporels. La Fig. 2.9 montre que le bilan de transferts thermiques est proche du développement à l'ordre 1 théorique $1 - \frac{y^+}{Re_\tau}$.

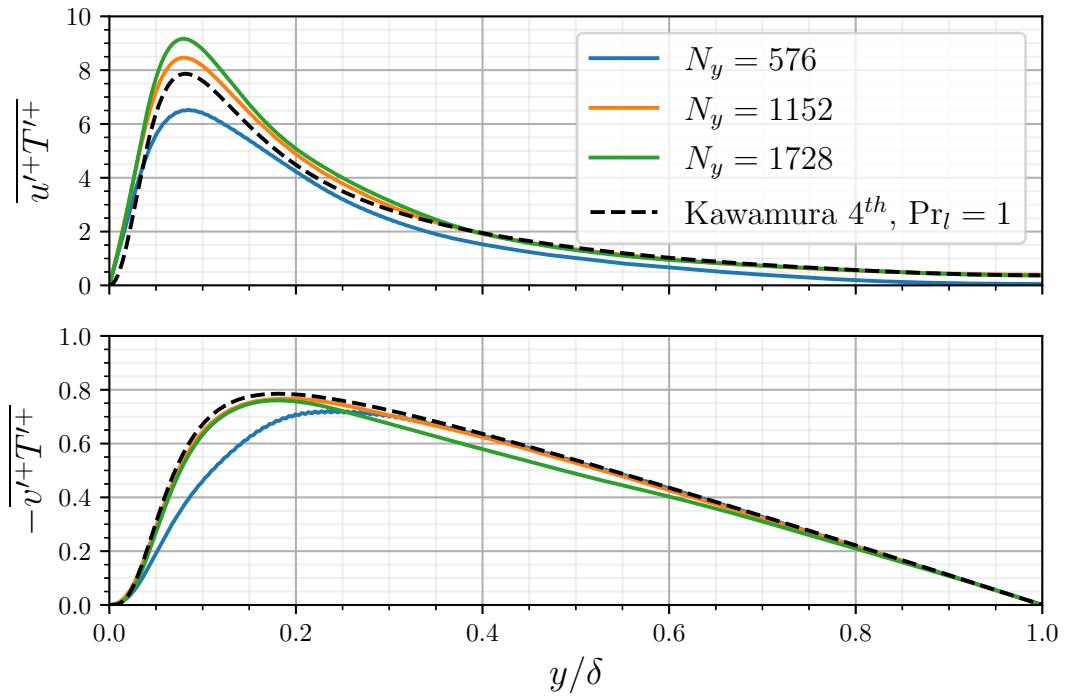


FIGURE 2.8 – Profil des statistiques du produit des fluctuations vitesse température.

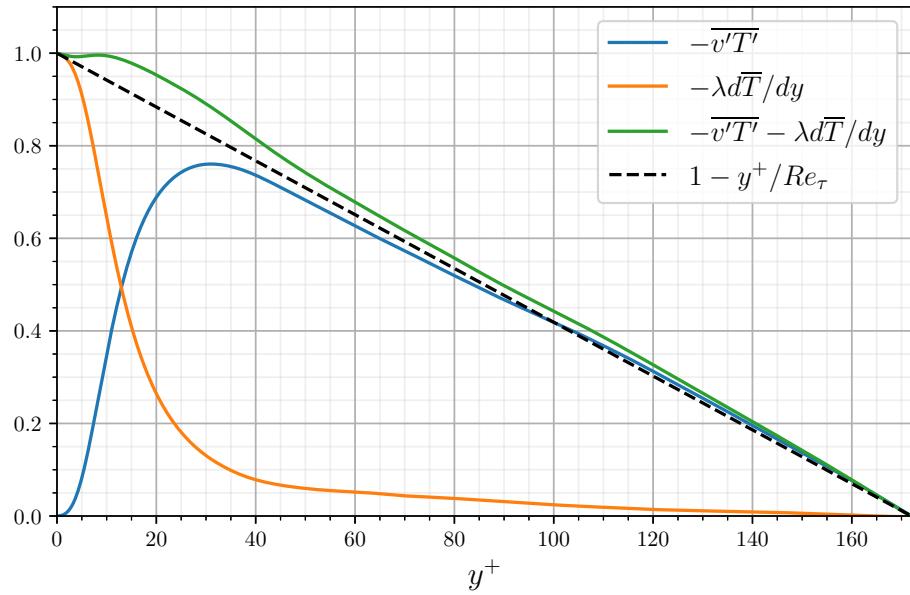


FIGURE 2.9 – Bilan des fluctuations $\overline{v'T'}$ pour le maillage le plus fin.

2.3.6 Nombre de Nusselt pariétal

Les nombres de Nusselt obtenus pour les trois simulations en fonction du temps sont tracés Fig. 2.10. Plus le maillage est fin et plus les simulations sont coûteuses, aussi le temps de statistique pris est plus court. Les nombres de Nusselt moyens obtenus sont proches de la valeur observée par KAWAMURA, ABE et MATSUO [46] ($Nu = 21,54$).

2.4 Le canal de DABIRI, diphasique à bulles

Ces concordances en statistiques dynamiques, thermiques, fluctuations mixtes et nombre de Nusselt permettent de valider le comportement du logiciel TrioCFD-IJK pour un cas monophasique. Cette fois-ci, c'est un écoulement en canal diphasique qui est étudié. L'écoulement est dans les mêmes conditions que le cas 2 présenté par DABIRI et TRYGGVASON [21].

2.4.1 Configuration

Dans ce cadre là, l'adimensionnement de la température proposé par DABIRI est le suivant :

$$T^* = \frac{\theta\lambda_l}{q_w\delta}, \quad (2.38)$$

avec δ la demi distance entre les parois du canal. Cette température adimensionnelle est représentée Fig. 2.11. L'écoulement va de gauche à droite et les parois sont en haut et en bas du pavé. La gravité est dirigé de droite à gauche, dans la direction x . L'axe normal aux parois est l'axe y . Ce sont ici les résultats pour un nombre de Prandtl égal à 1,00 ; d'autres valeurs du nb de Prandtl sont présentées ensuite.

Le maillage utilisé pour la simulation est présenté Tab. 2.3. Il s'agit d'un maillage identique à celui utilisé par DABIRI et TRYGGVASON [21]. Une étude de convergence en maillage aurait été souhaitable, mais n'a pas été réalisée pour des questions de moyen et de temps. Les paramètres concernant la taille du domaine,

N_x	N_y	N_z	N_{tot}	y^+
512	192	256	$25,17 \times 10^6$	0,61

TABLEAU 2.3 – Maillage utilisé pour la simulation du canal de bulles.

la dynamique de l'écoulement et les schémas de résolution de la dynamique sont répertoriés Tab. 2.4. Les paramètres adimensionnés de l'écoulement sont présentés

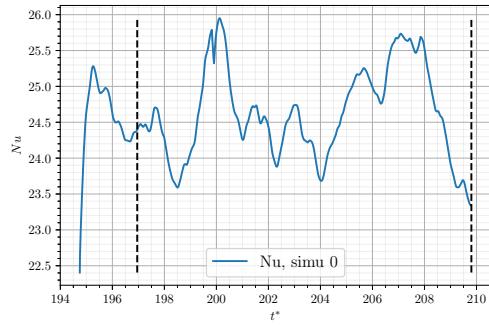
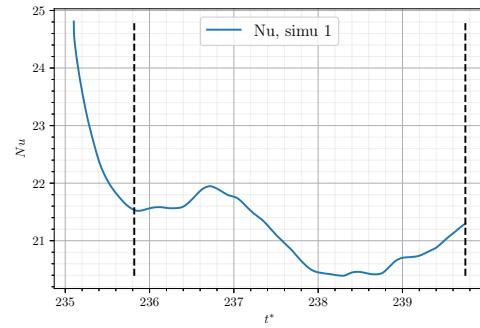
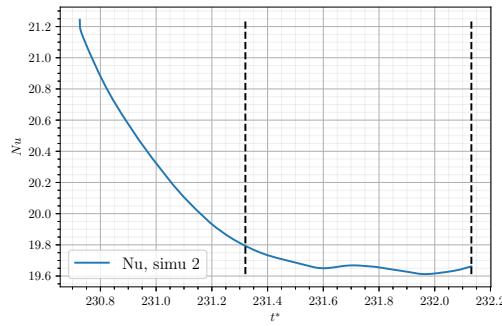
(a) Maillage grossier, $Nu_{\text{mean}} = 24,64$.(b) Maillage fin, $Nu_{\text{mean}} = 21,08$ (c) Maillage très fin, $Nu_{\text{mean}} = 19,67$

FIGURE 2.10 – Évolution au cours du temps physique du nombre de Nusselt. En pointillée les limites temporelle de début et de fin de prise de statistiques.

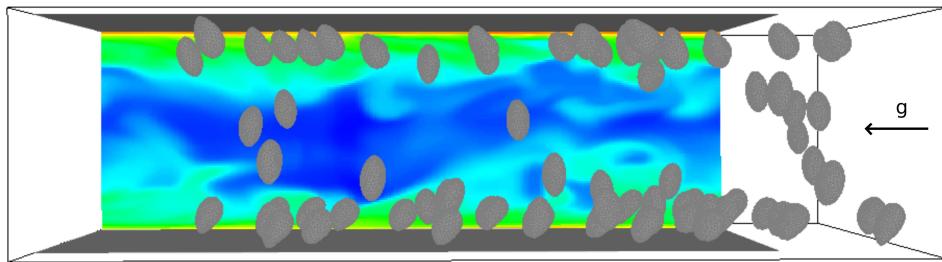


FIGURE 2.11 – Transferts thermiques en écoulement diphasique en canal à bulle (les bulles sur la droite qui dépassent du champ thermique sont dans un domaine étendu périodique, elles sont dupliquées dans la partie du champ qui apparaît vide à gauche, et interagissent avec le champ, mais ne sont pas représentées ici).

L_x	m	2π
L_y	m	2,00
L_z	m	π
D_b	m	0,30
N_b	—	84
ρ_l	kg m^{-3}	1,00
ρ_v	kg m^{-3}	0,10
μ_l	Pas	$3,33 \times 10^{-4}$
μ_v	Pas	$3,33 \times 10^{-4}$
σ	N m^{-1}	$3,00 \times 10^{-3}$
g	m s^{-2}	0,10
Schéma temps		RK3
Convection		Centré
Diffusion		Centré 4

TABLEAU 2.4 – Paramètres dynamiques utilisés pour les simulations en canal à bulles.

Tab. 2.5. Ils correspondent à un cas de canal faiblement turbulent ($Re_\tau = 127$), avec un taux de vide faible et des bulles légèrement déformables, qui vont principalement se répartir proches des parois.

α	—	3%
Re_τ	—	117
Eo	—	3,0
Ar	—	$2,43 \times 10^4$

TABLEAU 2.5 – Nombres adimensionnés de l’écoulement pour les simulations en canal à bulles. Le nombre de Reynolds est un résultat relevé sur la simulation, basé sur la mesure du frottement pariétal.

Les paramètres thermiques de l’écoulement sont décrits aux Tabs. 2.6 et 2.7. Huit champs thermiques sont résolus, avec des nombres de Prandtl allant de 0,10 à 7,00. Dans tous les cas, un flux constant est imposé aux parois et le terme source présenté en Éq. (2.1) est utilisé pour compenser l’énergie injectée, et rendre ainsi la température statistiquement stationnaire.

q_w	W m^{-2}	1,00
λ_l	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	0,10
λ_l/λ_v	—	1,00
$\rho c_{pl}/\rho c_{pv}$	—	1,00
Schéma temps		RK3
Convection		QUICK 3
Diffusion		Centré 2

TABLEAU 2.6 – Paramètres thermiques utilisés pour les simulations en canal à bulles.

2.4.2 La dynamique de l’écoulement à bulles en canal

La dynamique de ce type d’écoulement a été analysée et décrite dans la thèse de DU CLUZEAU [29]. Nous retrouvons ici une répartition du taux de vide piqué en paroi comme le montre la Fig. 2.12. Le profil de la vitesse liquide moyenne dans le canal est représenté en échelle logarithmique de la distance adimensionnée à la paroi Fig. 2.13. Ce profil montre bien que la vitesse axiale suit toujours en paroi la loi linéaire, malgré la présence de bulles, puis une loi logarithmique avec une constante modifiée par rapport à la constante universelle de Von Kármán. La

n°	c_{pl} $\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	Pr_l
0	$2,10 \times 10^3$	7,00
1	$7,85 \times 10^2$	2,62
2	$4,23 \times 10^2$	1,41
3	$3,00 \times 10^2$	1,00
4	$2,13 \times 10^2$	0,71
5	$1,50 \times 10^2$	0,50
6	$6,00 \times 10^1$	0,20
7	$3,00 \times 10^1$	0,10

TABLEAU 2.7 – Nombres de Prandtl associés aux capacités thermiques massique des champs thermiques simulés.

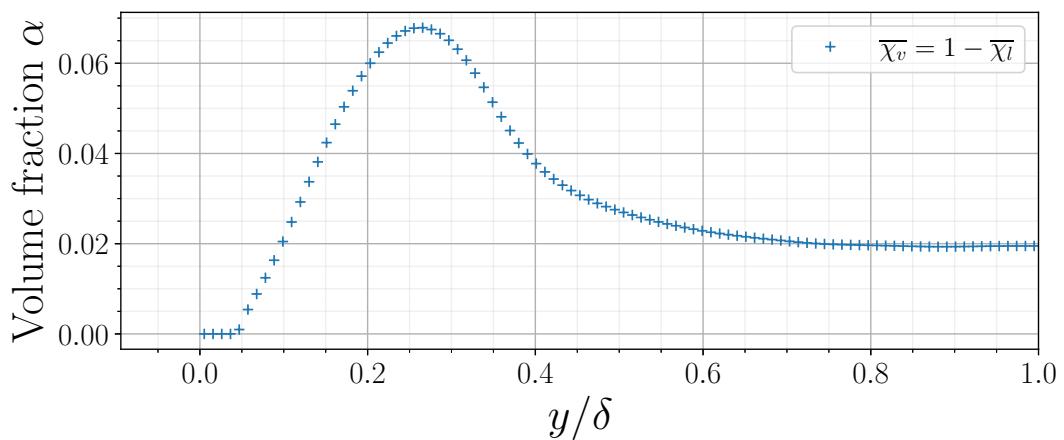


FIGURE 2.12 – Taux de vide dans le profil du canal.

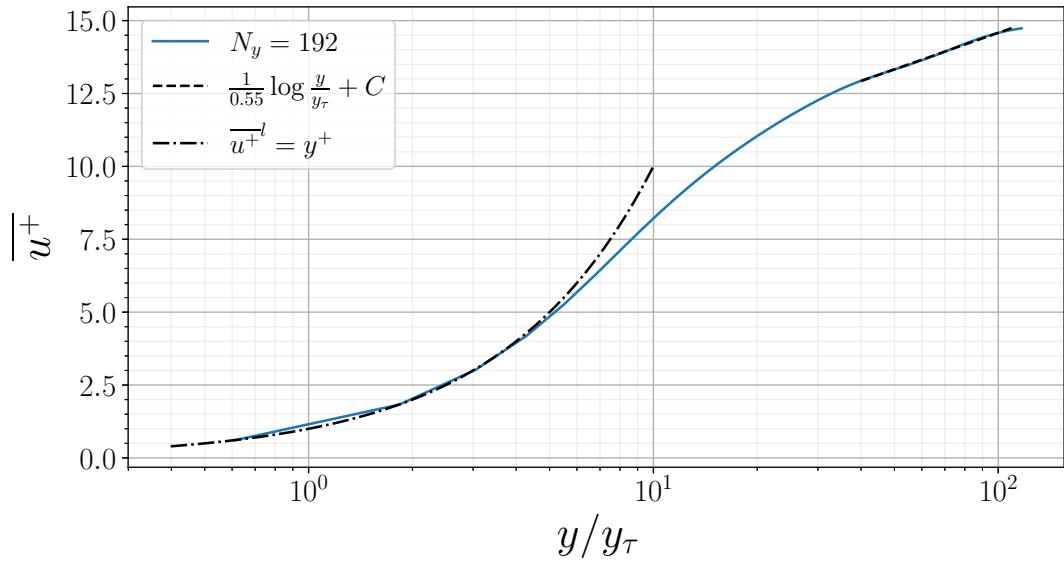


FIGURE 2.13 – Profil de vitesse liquide dans le canal en échelle logarithmique, loi linéaire en paroi et logarithmique au cœur du canal.

pente est plus faible, montrant une vitesse plus homogène au cœur du canal. La présence de bulles vient donc homogénéiser la vitesse au centre. Les fluctuations moyennes du tenseur de Reynolds liquide $\overline{u'_i u'_j}^l$ sont représentées aux Figs 2.14 pour la partie diagonale, et 2.15 pour la partie croisée. Elles ont un profil similaire aux fluctuations observées dans le cas monophasique. Le nombre de Reynolds pariétal plus faible ici est compensé par la présence de bulles qui augmentent les fluctuations.

2.4.3 Profil moyen des statistiques de température

Le profil de température moyenne du liquide dans le canal est représenté Figs. 2.16a, 2.16b et 2.16c, avec l'adimensionnement par T_τ . Une pente en $\overline{T^+}^l = \text{Pr}_l y^+$ est observée à la paroi. Puis une loi logarithmique est observée au cœur du canal, dont la pente est renseignée Fig. 2.16c, et tracée en fonction du nombre de Prandtl Fig. 2.17. L'inverse du coefficient de pente de cette loi logarithmique, κ_{th} ($\overline{T^+}^l = \frac{1}{\kappa_{th}} \log(\text{Pr}_l y^+) + c$) suit une loi inverse du nombre de Prandtl et tend vers 0,24 aux forts nombres de Prandtl. Autour d'un nombre de Prandtl de 1,00, les valeurs de κ_{th} observées en diphasiques sont nettement plus faibles que celles relevées en monophasique (0,26 contre 0,33 dans notre simulation monophasique et 0,43 dans la simulation de KAWAMURA à $\text{Pr}_l = 1$). Ces résultats ne sont pas obtenus

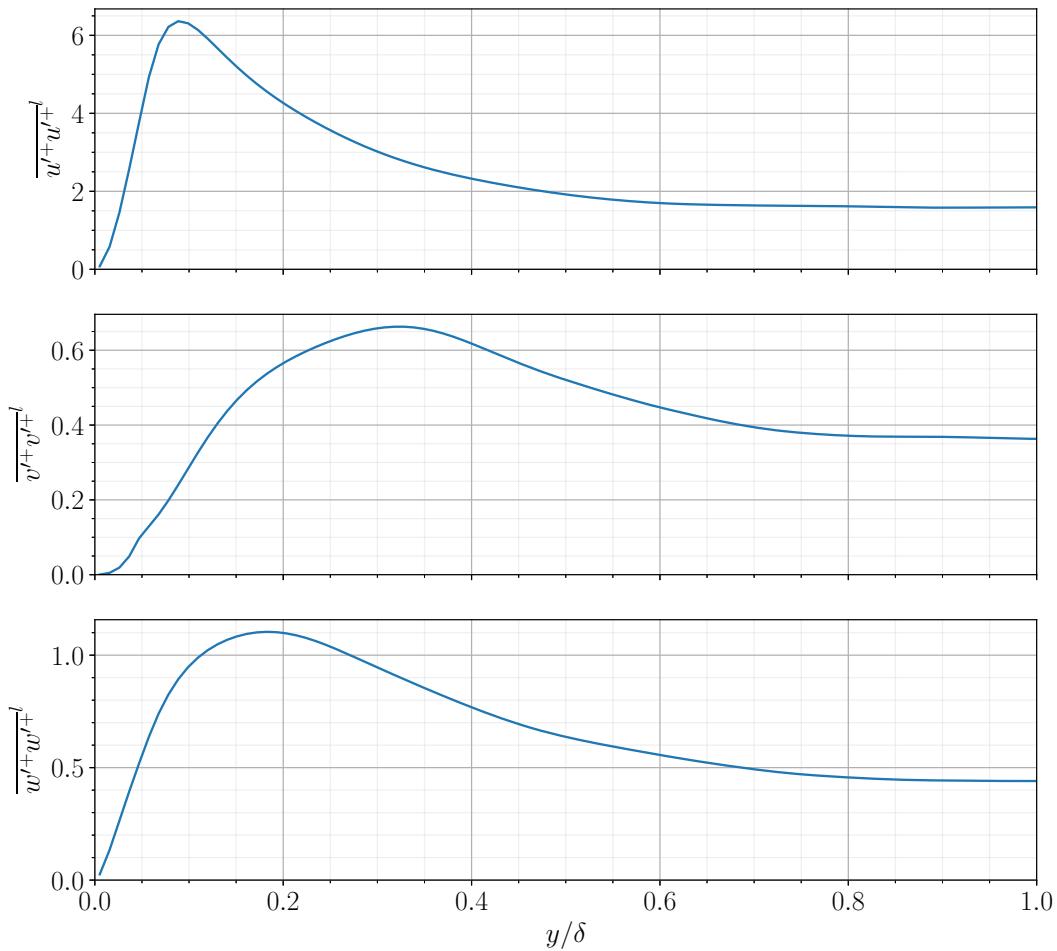
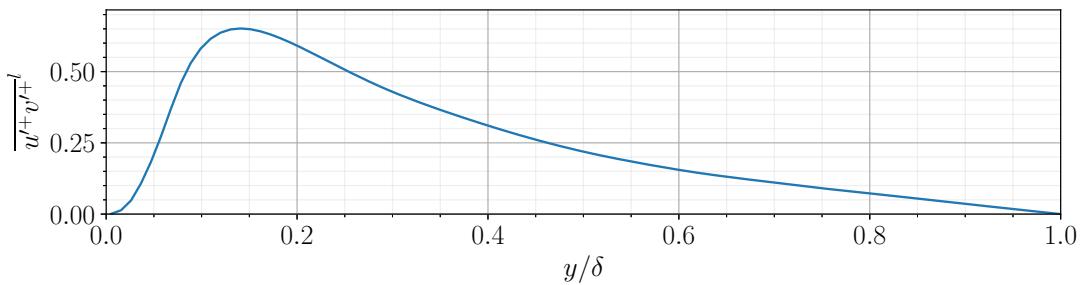
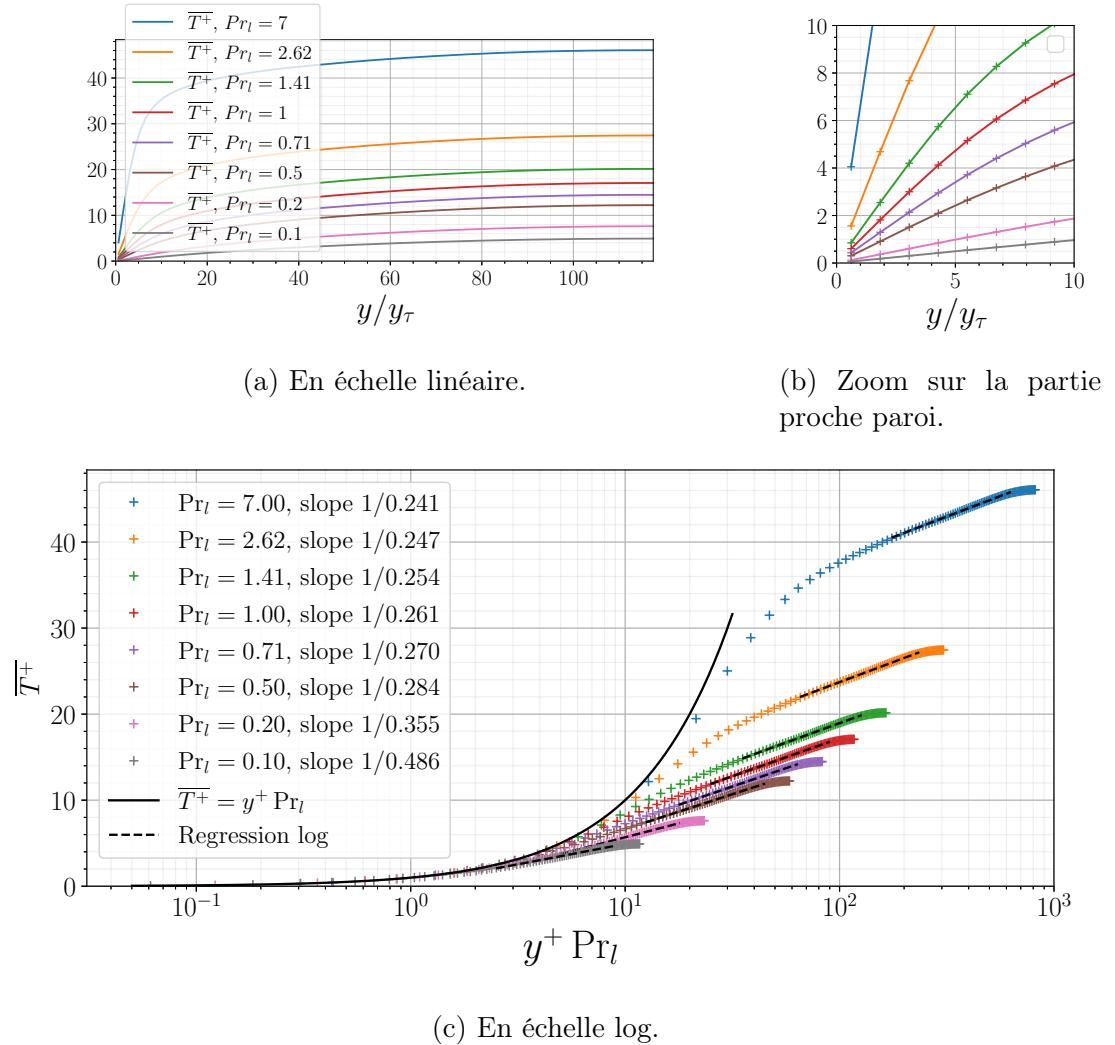


FIGURE 2.14 – Fluctuations moyennes de vitesse liquide diagonales.

FIGURE 2.15 – Fluctuation moyenne du produit $\overline{u'^+v'^+}^l$.

FIGURE 2.16 – Profil de température, adimensionné par T_τ .

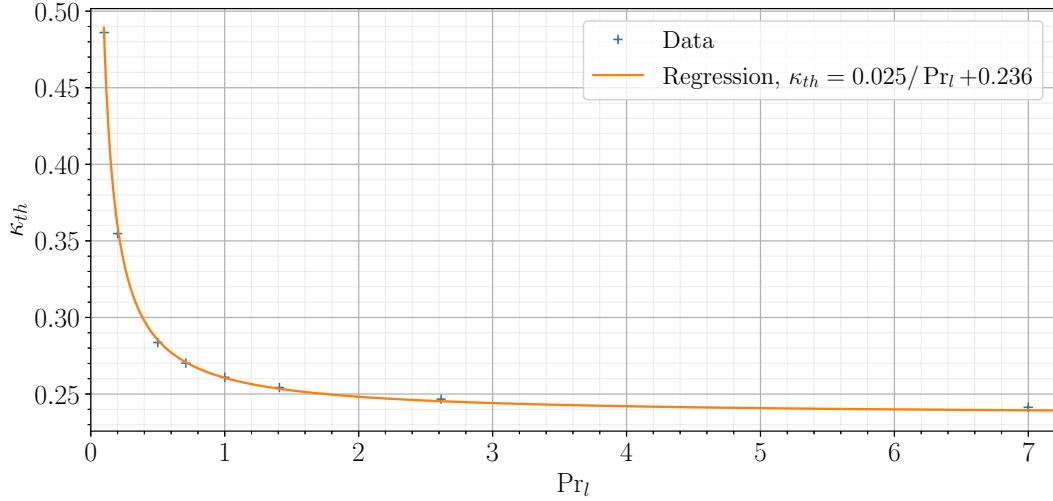


FIGURE 2.17 – Coefficient de la loi logarithmique en fonction du nombre de Prandtl.

avec les mêmes nombres de Reynolds, mais en supposant que la dépendance au nombre de Reynolds est de second ordre, cela permet d'en déduire que la présence de bulles augmente la pente de la loi logarithmique pour un même nombre de Prandtl. En effet, la température adimensionnée dans le canal au début de la loi logarithmique ($y^+ \approx 30$) est plus élevée dans le canal monophasique, et la température à la fin de la loi logarithmique ($y^+ \approx 100$) est à peu près identique. La présence des bulles refroidit comparativement le liquide dans la zone tampon pour ce nombre de Prandtl.

2.4.4 Statistiques des fluctuations vitesse-température

Le profil des statistiques de fluctuations vitesse-température Fig. 2.18 est similaire à celui obtenu dans le cas monophasique. Dans le cadre du modèle Simple Gradient Diffusion Hypothesis, la fluctuation $\overline{v'^+ T'^+}^l$ est supposée proportionnelle au gradient de température moyenne. Ainsi,

$$\overline{v'^+ T'^+}^l = \frac{\mu^t}{\text{Pr}^t} \frac{d\overline{T^+}^l}{dy^+}, \quad (2.39)$$

avec $\mu^t = \frac{\overline{u'^+ v'^+}^l}{d\overline{u^+}^l / dy^+}$ le coefficient de viscosité turbulente. Un modèle de viscosité turbulente est alors aussi nécessaire, par exemple : $\mu^t = \rho C_\mu k^2 / \epsilon$ dans le cadre

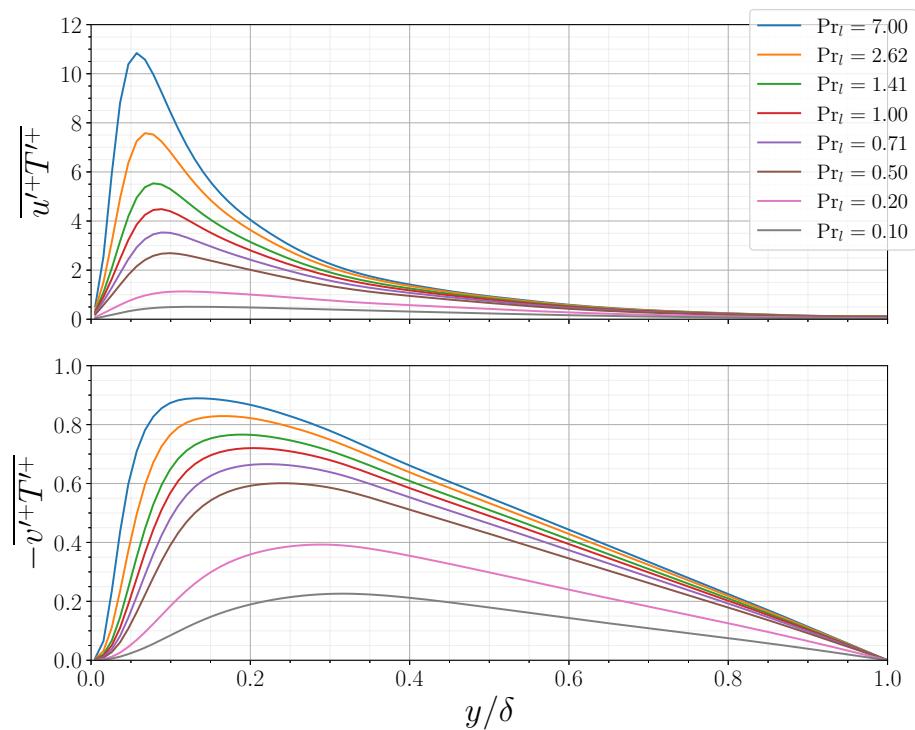


FIGURE 2.18 – Moyenne des fluctuations vitesse-température $\overline{u'^+T'^+}$

des modèles $k-\epsilon$. Le coefficient de Prandtl turbulent est évalué pour les différents champs de température et son profil est tracé Fig. 2.19, ainsi que les résultats du modèle comparé aux statistiques obtenues. Le coefficient de viscosité turbulente est ici calculé à partir de sa définition et non selon son modèle. La valeur classique

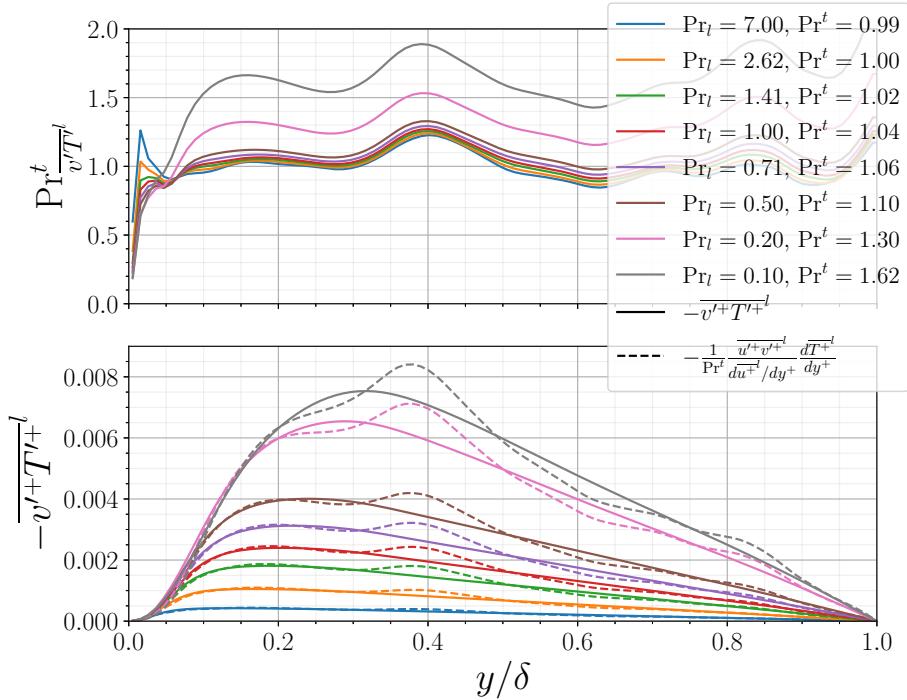


FIGURE 2.19 – Modèle SGDH pour $\overline{v'^+ T'^+}^l$.

du nombre de Prandtl turbulent dans ce modèle en monophasique est de 0,90. Les valeurs obtenues ici sont plus élevées. Plus le nombre de prandtl est élevé, et donc plus les phénomènes de turbulence thermique sont importants et à petite échelle, plus ce nombre décroît et tend vers une valeur proche de l'unité. Il est intéressant de noter que les fluctuations $\overline{v'_k T'_k}^k$ sont très bien approchées par ce type de modèle à condition cependant que la contrainte turbulente dynamique $\overline{u'_k v'_k}^k$ soit bien prédite. On remarque aussi que la corrélation semble très bien fonctionner avec la fluctuation totale de vitesse, incluant sans distinction les effets monophasiques classiques, la turbulence induite par les bulles et les effets de sillages. Ces premiers résultats sont très prometteurs et ouvrent des perspectives très intéressantes à étendre à des conditions physiques et d'écoulement plus larges.

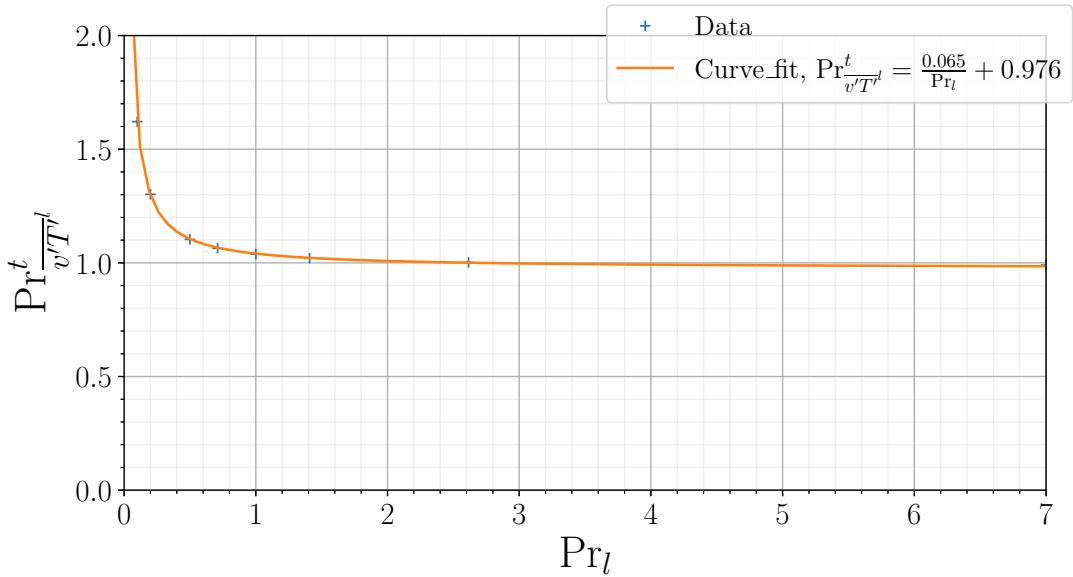


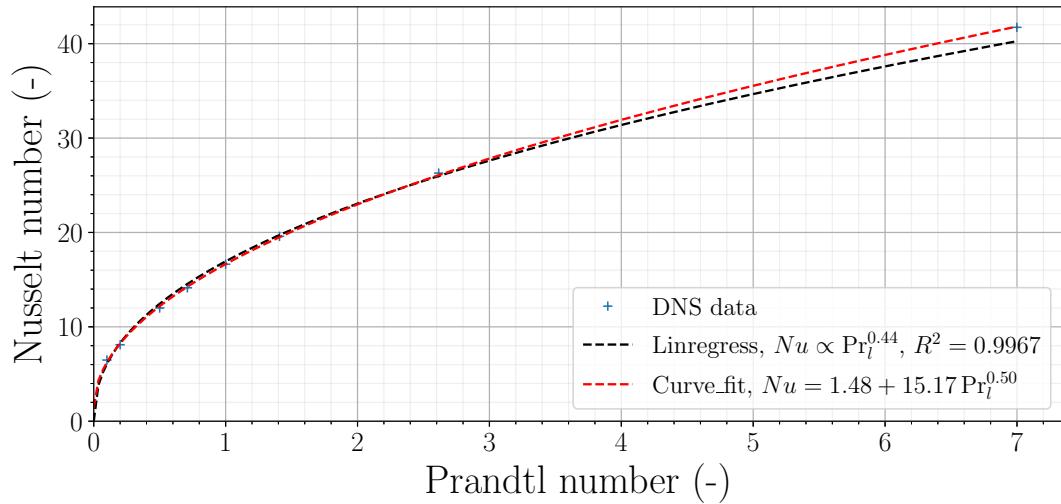
FIGURE 2.20 – Nombre de Prandtl turbulent en fonction du nombre de Prandtl liquide.

2.4.5 Nombre de Nusselt de canal

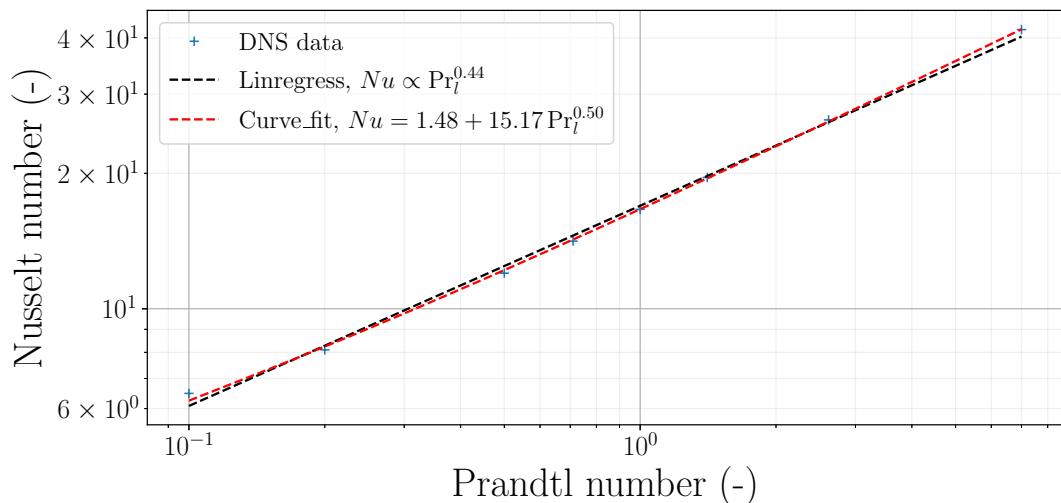
Le nombre de Nusselt de transfert de chaleur en paroi est défini dans ce canal à bulle de la manière suivante :

$$Nu = \frac{2}{\langle \theta^+ \rangle_y} \quad (2.40)$$

DABIRI obtient une valeur moyenne de 41,90 pour un nombre de Prandtl égal à 7,00, qui est très proche du nombre de Nusselt moyen de 41,70 observé dans nos simulations. Nous employons un maillage similaire au leur, probablement pas totalement convergé pour ce nombre de Prandtl. Cependant, ces résultats très proches avec 2 outils numériques différents sont très intéressants et confortent la validité de nos simulations. Le nombre de Nusselt évolue avec le nombre de Prandtl selon une loi puissance sur la Fig. 2.21. Ainsi, les données suivent une loi telle que $Nu = 1,48 + 15,17\sqrt{Pr_l}$. À nouveau, ce sont des résultats originaux qui pourront être poursuivis par la suite dans des études à différents nombres de Reynolds, différents taux de vide et différents rapports de paramètres thermiques.



(a) En échelle linéaire.



(b) En échelle logarithmique.

FIGURE 2.21 – Nombre de Nusselt en fonction du nombre de Prandtl liquide.

Conclusions

Résumé du chapitre

Des exemples de simulations en canaux, monophasiques et diphasiques, sont présentés pour montrer la capacité du code à décrire la température dans des écoulements turbulents.

Pour le cas du canal monophasique les résultats obtenus sont très proches de ceux obtenus par KAWAMURA, ABE et MATSUO, ce qui permet de valider la résolution de l'équation thermique en absence de bulles.

Pour le cas du canal diphasique, les résultats obtenus sont concordants avec ceux de DABIRI et TRYGGVASON. Ce calcul a permis une première étude en nombre de Prandtl, avec notamment l'évolution pour un nombre de Reynolds donné du coefficient de la loi logarithmique thermique en fonction du nombre de Prandtl liquide, du coefficient de Prandtl turbulent dans le cadre du modèle SGDH et du nombre de Nusselt des transferts pariétaux.

Ces résultats sont très concluants et viennent apporter de nouvelles informations sur les corrélations de fermetures diphasiques à $Re_\tau = 127$. Les moyens de calculs actuels permettent d'envisager la bonne convergence de ce type de simulations à des nombres de Reynolds un peu plus élevés et nos travaux ont permis de montrer à la fois les capacités numériques de l'outil et la pertinence physique de ce type de simulation pour améliorer la modélisation. Cependant quelques limites dans la formulation des conditions aux limites en paroi (différente de celles de KAWAMURA) et la complexité de la convergence d'un calcul en présence de paroi nous ont amené à considérer dans un premier temps des écoulements plus simples. C'est dans cette optique que l'étude sur des essaims est réalisée et présentée au Chap. 3.

Chapitre **3**

Étude en essaim de bulles

Sommaire du présent chapitre

3.1 La physique d'un essaim homogène de bulles	72
3.1.1 Équations locales	73
3.1.2 Écoulement et transferts moyens	74
3.1.3 La mise en place du calcul	76
3.2 Convergence en maillage des simulations	77
3.2.1 Mise en place de 4 maillages	78
3.2.2 Convergence de la thermique	79
3.3 Étude en nombre de Prandtl à $Re = 400$	82
3.3.1 Vue d'ensemble	83
3.3.2 Invariance par adimensionnement	85
3.3.3 Nombre de Nusselt global	85
3.3.4 Modèles de nombre de Nusselt de la littérature . . .	90
3.3.5 Nombre de Nusselt liquide	93
3.3.6 Utilisation d'une interpolation type Richardson pour le nombre de Nusselt liquide	96
3.4 Étude en nombre de Reynolds	97
3.4.1 Des champs dynamiques différents	100
3.4.2 Des champs thermiques différents	100
3.4.3 Une dépendance du nombre de Nusselt au nombre de Péclet	101
Conclusions	104

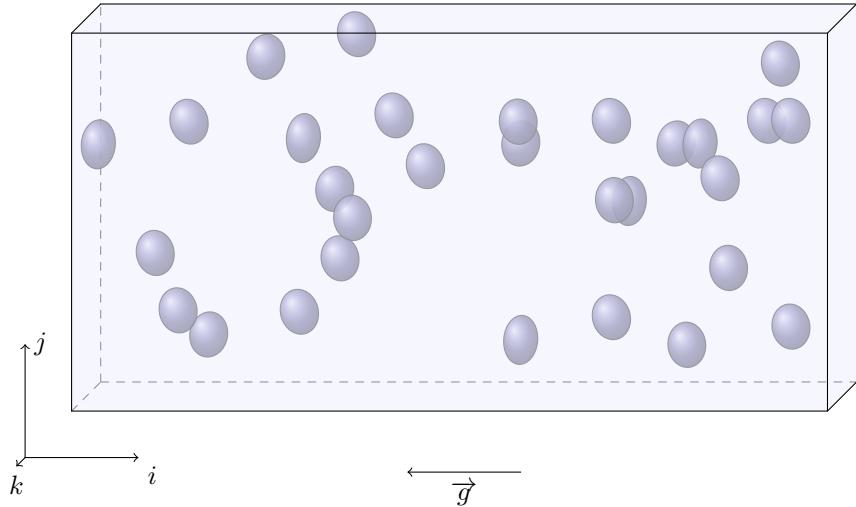


FIGURE 3.1 – Schéma des bulles dans le domaine de simulation.

Dans ce chapitre, les résultats obtenus pour plusieurs calculs en essaims sans saut de propriétés thermiques sont présentés. Ces simulations sont réalisées sur différents maillages pour étudier la convergence des résultats, à différents nombres de Reynolds et avec différentes propriétés thermiques, afin de modéliser les comportements thermiques en fonction du nombre de Prandtl par exemple. Après la présentation du cas de l'essaim Sec. 3.1, une étude de convergence en maillage est réalisée Sec. 3.2 pour montrer le domaine dans lequel nos simulations sont valides. Puis le cas de l'essaim à $Re_b = 400$ est étudié en détail Sec. 3.3, notamment la dépendance du nombre de Nusselt aux variables de l'écoulement. Enfin, une étude en nombre de Reynolds est réalisée en Sec. 3.4 sur la plage $200 - 800$.

3.1 La physique d'un essaim homogène de bulles

Un essaim de bulles est un cas où des bulles sont réparties dans une boîte fictive. La boîte présente des conditions de périodicité dans chaque direction pour la vitesse, la température et les bulles. Ainsi, quand une bulle sort par l'un des bords de la boîte, elle rentre du côté opposé. L'essaim étudié est monodispersé. L'écoulement est soumis à la gravité. Les bulles, sous l'action de la poussée d'Archimède remontent dans la direction opposée et leur vitesse atteint un régime statistiquement stationnaire qui correspond à l'équilibre avec les frottements dus à la viscosité. C'est cette phase de l'écoulement, statistiquement stationnaire, qui nous intéresse. Pour ce qui est de la température, dans ce cas elle n'est pas statis-

tiquement stationnaire. En effet, un déséquilibre de température entre les phases est imposé initialement et tend au cours du temps vers une même valeur à cause de la diffusion. Donc les valeurs de température moyennées par phase sont fonction du temps. Nous utiliserons ensuite un adimensionnement indépendant du temps, présenté Éq. (3.11).

3.1.1 Équations locales

Hypothèses Les hypothèses physiques faites pour cette simulation d'essaim sont les mêmes que pour l'écoulement en canal :

- l'écoulement est incompressible et le fluide newtonien,
- le coefficient de tension de surface σ est constant,
- il n'y a pas de coalescence ni de fragmentation,
- les transferts thermiques suivent une loi de Fourier,
- et il n'y a pas de changement de phase.

Sous ces hypothèses, les équations de Navier-Stokes s'écrivent de la manière suivante dans chaque phase k :

$$\nabla \cdot \underline{v}_k = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho_k \underline{v}_k}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_k \underline{v}_k \underline{v}_k) - \nabla p_k + \rho_k \underline{g} + \nabla \cdot (\nu_k (\nabla \underline{v}_k + \nabla^\top \underline{v}_k)) \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \rho_k c_{p_k} T_k}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_k c_{p_k} \underline{v}_k T_k) + \nabla \cdot (\lambda_k \nabla T_k) \quad (3.3)$$

Et les conditions aux interfaces entre les deux phases sont les suivantes :

$$\underline{v}_l = \underline{v}_v \quad (3.4)$$

$$T_l = T_v, \quad (3.5)$$

$$\sum_k \lambda_k \nabla T_k \cdot \underline{n}_k = 0, \quad (3.6)$$

avec \underline{n}_k le vecteur unitaire normal à l'interface dirigé vers l'extérieur de la phase k (par convention).

Conditions aux limites Les conditions imposées sont la périodicité dans les trois directions. Seule la direction de la gravité est donc distincte des deux autres. C'est la gravité, par le biais de la force de flottabilité qui induit un écoulement. Cet écoulement présente une vitesse relative moyenne entre les bulles et le fluide moyenne qui finit par s'établir en partant d'un champ de vitesse initiallement nul.

3.1.2 Écoulement et transferts moyens

Moyennes dans un essaim L'écoulement est considéré statistiquement homogène dans les trois directions étant donnée la périodicité imposée. Ainsi,

$$\partial_x \cdot = 0, \quad (3.7)$$

$$\partial_y \cdot = 0, \quad (3.8)$$

$$\partial_z \cdot = 0, \quad (3.9)$$

$$(3.10)$$

avec \cdot n'importe quelle variable locale de l'écoulement. Dans le cas du swarm :

- la moyenne statistique devient : $\bar{a}(t) = \frac{\sum_{i,j,k} a_{i,j,k}(t)}{n}$, avec n le nombre de cellules, ou encore $n = \sum_{i,j,k} 1$.
- la moyenne par phase s'écrit de la même manière $\bar{a}^k(t) = \frac{\bar{a}_k \chi_k}{\chi_k}$.

Le code IJK post-traite les moyennes $\chi_k \bar{a}_k$. Afin d'évaluer les différents termes de ces équations, les valeurs mesurées dans l'essaim seront :

- la température moyenne de chaque phase au cours du temps,
- la température de l'interface au cours du temps,
- la vitesse moyenne de chaque phase au cours du temps.

Statistiques de température La nécessité de prendre des statistiques pour mesurer des valeurs donne dans le cadre numérique des résultats plus ou moins bien convergés selon la taille du domaine, le temps d'intégration, et même l'état de stationnarité statistique atteint. La moyenne la plus fiable porte donc simultanément sur le temps et l'espace (dans les directions homogènes). Cependant, dans le cas du swarm, le problème est que les variables d'intérêt ne tendent pas vers un état statistique homogène qui nous intéresse (elles tendent à s'uniformiser, toutes les dérivées tendent vers zéro). Les statistiques ne vont donc pas être directement calculées sur la variable d'intérêt T , mais sur θ une température adimensionnée. Cette température s'écrit :

$$\theta(x, y, z, t) = \frac{T(x, y, z, t) - T_f}{\bar{T}^v(t) - \bar{T}^l(t)}, \quad (3.11)$$

avec T_f la température finale uniforme dans l'essaim, \bar{T}^l et \bar{T}^v les moyennes par phase de température liquide et vapeur, qui seront aussi notées T_l et T_v . La moyenne spatiale de $\theta(x, y, z, t)$ donne une variable statistiquement stationnaire. Il

s'agit ici d'une intuition, qui est vérifiée Fig. 3.12. En effet, $\overline{\theta\chi} = \overline{\overline{\theta\chi}^X}^t(t)$ et donc

$$\overline{T}^k = T_f + \frac{\overline{\theta\chi_k}^{Xt}}{\overline{\chi_k}^{Xt}} \left(\overline{T}^v - \overline{T}^l \right). \quad (3.12)$$

Équation de température moyenne L'équation Euler-Euler Éq. (2.26) de la température devient donc :

$$\rho_k c_{p_k} \frac{dT_k}{dt} = - \frac{\underline{q}_k \cdot \underline{n}_k \delta_I}{\alpha_k}. \quad (3.13)$$

En remplaçant la moyenne statistique par une intégrale sur le volume de calcul, cela donne :

$$\rho_k c_{p_k} \frac{dT_k}{dt} = - \frac{1}{V \alpha_k} \int_V \underline{q}_k \cdot \underline{n}_k \delta_I dV, \quad (3.14)$$

qui s'écrit encore

$$\rho_k c_{p_k} \frac{dT_k}{dt} = - \frac{1}{V_k} \int_{S_I} \underline{q}_k \cdot \underline{n}_k dS. \quad (3.15)$$

Le nombre de Nusselt des transferts interfaciaux est défini comme :

$$\text{Nu}_k = \frac{Q D_b}{S_I \lambda_k \Delta T}, \quad (3.16)$$

avec $Q_l = - \int_{S_I} \underline{q}_l \cdot \underline{n}_l dS$. Et donc, l'équation Éq. (3.15) s'écrit :

$$\text{Nu}_k = \frac{\rho_k c_{p_k} \frac{dT_k}{dt} D_b V_k}{S_I \lambda_k \Delta T}, \quad (3.17)$$

avec T_k la température moyenne de la phase k , D_b le diamètre d'une bulle, V_k le volume total occupé par la phase k , S_I l'aire de la surface d'échange et $\Delta T = T_v - T_l$. Si le nombre de Nusselt tends vers une constante, alors on peut résoudre l'équation sur \overline{T}^l qui donne :

$$\Delta T = \Delta T_0 \exp(-(K_l - K_v)t) \quad (3.18)$$

$$\overline{T}^l = T_{l_0} \exp(-(K_l - K_v)t) + T_f \quad (3.19)$$

Et on retrouve donc bien (3.12) avec $\overline{\theta}^l = \frac{T_{l_0}}{\Delta T_0}$. On en déduit que $\overline{\chi}^k$ ne dépend pas du nombre de Nusselt, mais uniquement des conditions initiales de température.

3.1.3 La mise en place du calcul

Méthodes numériques La simulation utilise le formalisme monofluide, des schémas de type volumes différences finis et le front-tracking, décrits au Chap. 1. Ce formalisme a été validé pour la dynamique dans la thèse de DU CLUZEAU [29]. Il est valable pour la thermique dans la mesure où il n'y a pas de saut de propriétés entre les deux phases. Cela a été validé dans le cas monophasique et diphasique en canal au Chap. 2.

Géométrie Le domaine de simulation est pris tel que décrit Tab. 3.1. Le taux de vide est de 6% pour toutes les simulations. Ce taux de vide correspond à un régime où les phénomènes de coalescence et de fragmentation peuvent être négligés. Les bulles sont initialement sphériques et distribuées aléatoirement dans le domaine de manière à ne pas s'intersecter.

L_x (m)	L_y (m)	L_z (m)	N_b	D_b (m)	α
0,020	0,005	0,005	57	$1,00 \times 10^{-3}$	6%

TABLEAU 3.1 – Valeurs géométriques de la simulation.

Dynamique Pour arriver à simuler la décroissance de l'écart de température moyen entre les phases au cours du temps, la simulation est d'abord amenée à convergence sur la dynamique sans inclure de champ de température. Des simulations sont réalisées pour plusieurs nombres de Reynolds visés. Pour cela, le rapport de viscosité entre les deux phases change entre ces simulations, comme décrit Tab. 3.2. Les autres valeurs, notamment celles des masses volumiques des deux phases restent identiques pour toutes les simulations, comme présenté Tab. 3.3.

Thermique Quand l'écoulement est établi, c'est-à-dire que le nombre de Reynolds de l'écoulement, déterminé à partir de la différence de vitesse entre la phase vapeur et la phase liquide est à peu près stable, la partie thermique est introduite dans la simulation. Une température de 1 K est imposée dans la phase vapeur et de 0 K dans la phase liquide. Il est à noter que ces valeurs initiales de température peuvent être choisies arbitrairement car l'équation d'évolution de la température est invariante par translation de la température. L'écart initial n'est pas non plus une valeur importante car l'équation est aussi invariante par multiplication par un scalaire. Après avoir imposé ce champ de température initiale, la

Nombre de Reynolds visé	μ (Pas)	
	Liquide	Vapeur
200	$7,06 \times 10^{-4}$	$1,35 \times 10^{-5}$
400	$3,53 \times 10^{-4}$	$1,35 \times 10^{-5}$
600	$2,38 \times 10^{-4}$	$1,35 \times 10^{-5}$
800	$1,89 \times 10^{-4}$	$1,35 \times 10^{-5}$

TABLEAU 3.2 – Paramètres dynamiques utilisés pour les différentes simulations selon le nombre de Reynolds visé.

Propriété	Unité	Valeur
ρ_l	kg m^{-3}	$1,17 \times 10^3$
ρ_v	kg m^{-3}	$8,76 \times 10^1$
σ	N m^{-1}	$1,81 \times 10^{-2}$
$g \cdot n_x$	m s^{-2}	-9,81

TABLEAU 3.3 – Paramètres dynamiques utilisés pour toutes les différentes simulations.

simulation est reprise avec plusieurs champs de température utilisant des propriétés différentes afin d'avoir des résultats pour plusieurs nombres de Prandtl. Dans ces simulations, la conductivité thermique est constante dans les deux phases, $\lambda = 1,00 \times 10^{-1} \text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$. Le rapport de capacité thermique massique entre le liquide et la vapeur est constant, de sorte que le produit avec la masse volumique soit constant sur les deux phases. Les valeurs sont reportées Tab. 3.4. Ces valeurs sont choisies de sorte à être dans la même gamme de propriétés qu'un écoulement eau-vapeur à 150 bars.

3.2 Convergence en maillage des simulations

Les simulations ont été mises en place sur plusieurs maillages afin d'étudier leur convergence. Cette convergence est étudiée sur deux valeurs intégrées sur le domaine, le nombre de Nusselt associé à l'écoulement et l'évolution de la température interfaciale.

n°	c_p J kg $^{-1}$ K $^{-1}$	
	Liquide	Vapeur
1	$1,98 \times 10^3$	$2,65 \times 10^4$
2	$7,41 \times 10^2$	$9,92 \times 10^3$
3	$3,99 \times 10^2$	$5,34 \times 10^3$
4	$3,61 \times 10^2$	$4,83 \times 10^3$
5	$2,83 \times 10^2$	$3,79 \times 10^3$
6	$2,51 \times 10^2$	$3,36 \times 10^3$
7	$2,01 \times 10^2$	$2,69 \times 10^3$
8	$1,70 \times 10^2$	$2,27 \times 10^3$
9	$1,42 \times 10^2$	$1,90 \times 10^3$
10	$1,13 \times 10^2$	$1,51 \times 10^3$
11	$8,49 \times 10^1$	$1,14 \times 10^3$
12	$5,66 \times 10^1$	$7,57 \times 10^2$
13	$2,83 \times 10^1$	$3,78 \times 10^2$

TABLEAU 3.4 – Paramètres thermiques utilisés pour les différents champs thermiques.

3.2.1 Mise en place de 4 maillages

Les 4 maillages utilisés pour les simulations sont décrits Tab. 3.5. Ils ont été choisis à peu près un facteur $\sqrt{2}$ entre deux maillages consécutifs. Mais la définition d'un maillage, selon le nombre de mailles dans chaque direction, réparties sur un certain nombre de processeurs dans chaque direction, eux-mêmes répartis sur un nombre défini de noeuds, donne des facteurs et des charges par processeur un peu différents d'un maillage à l'autre.

TABLEAU 3.5 – Description des 4 maillages et des coûts de calcul associés (performance observée sur Occigen).

n°	Nom	$n_{mailles}$			$n_{mailles_{tot}}$ (en millions)	n_{procs}			$n_{procs_{tot}}$	Temps calcul / timestep (s)
		x	y	z		x	y	z		
1	coarse	384	96	96	3,54	12	3	3	108	6,62
2	normal	512	128	128	8,39	16	4	4	256	11,03
3	fin	720	192	192	26,54	15	6	4	360	24,27
4	tfin	1056	256	256	69,21	22	8	6	1056	27,44

Les temps de calcul par pas de temps varient principalement selon deux paramètres : le nombre de processeurs et le nombre de mailles réparti par processeur. Le premier augmente le temps de communication entre les processeurs, mais permet de baisser le second, qui augmente le temps de calcul lors des parcours des mailles. L'évolution de ce temps est représenté Fig. 3.2. Il est à noter que la valeur du pas de temps elle-même diminue aussi en fonction du nombre de mailles par direction, à cause des contraintes de stabilité. Mais cette augmentation du nombre de pas de temps pour un même temps de simulation n'est pas représentée ici.

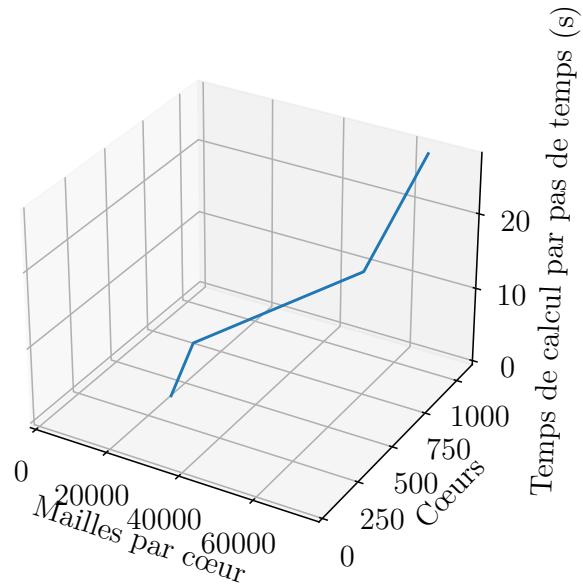


FIGURE 3.2 – Évolution du temps de calcul par pas de temps en fonction de la taille du calcul (nombre de mailles par cœur et nombre total de cœurs).

Dynamique La dynamique de l'écoulement n'est pas exactement identique entre les quatre simulations comme cela est représenté Fig. 3.3. Le maillage le plus fin donne un nombre de Reynolds légèrement plus grand que les autres. Un temps de simulation plus grand aurait été souhaitable pour le maillage le plus fin, mais il a été limité pour des raisons techniques.

3.2.2 Convergence de la thermique

La température La Fig. 3.4 montre l'évolution de la température instantanée moyenne pour chaque phase pour les quatre maillages. Cette figure met en évidence

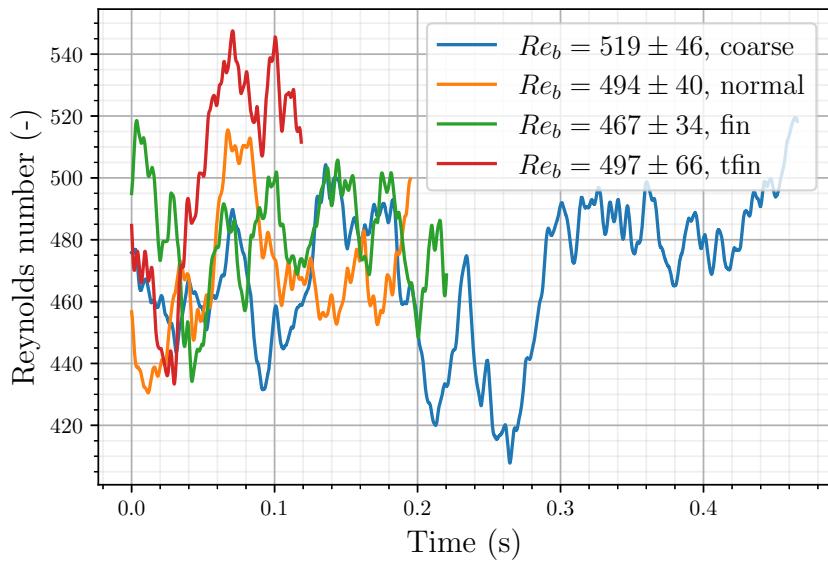


FIGURE 3.3 – Nombre de Reynolds en fonction du temps pour les différents maillages.

la convergence des profils d'évolution de température. Plus le maillage est fin, moins l'écart avec le maillage précédent est important.

Le nombre de Nusselt La Fig. 3.5 montre que les courbes de nombre de Nusselt, défini Éq. (3.16), au cours du temps convergent aussi vers une valeur stable identique pour $t \in [0,01; 0,08]$. Une deuxième tendance peut être observée sur ces courbes : plus le maillage est fin et plus le nombre de Nusselt est constant longtemps. Cela montre que pour un maillage plus grossier, les résultats avec un nombre Nusselt constant au cours du temps sont stables moins longtemps. Cela est aussi pris en compte dans le calcul du nombre de Nusselt moyen pour les différents maillages. La Fig. 3.9 montre quant à elle la convergence du nombre de Nusselt mesuré pour un même champ thermique (même nombre de Prandtl) sur les différents maillages. Une interpolation en fonction puissance nous donne une valeur théorique d'un nombre de Nusselt à pas de maillage nul. Ce pas est défini comme étant la longueur de la diagonale d'une maille. L'interpolation est réalisée, comme les autres interpolations de ce chapitre grâce à la méthode `curve_fit` de SciPY. La puissance de convergence, de l'ordre de 2,40 est du bon ordre de grandeur (≈ 2 pour la diffusion). L'ordonnée à l'origine détermine la valeur d'un nombre de Nusselt théorique pour un maillage infiniment fin. Ces valeurs sont désignées sous le nom de nombre de Nusselt déterminé par interpolation de Richardson. Il ne s'agit

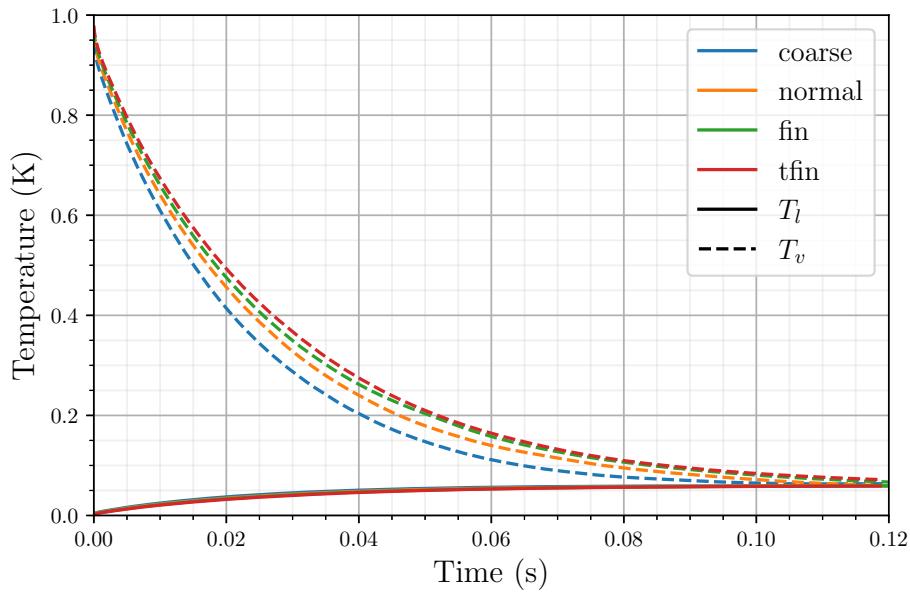


FIGURE 3.4 – Évolution des températures par phase pour les différents maillages pour le champ thermique à $\text{Pr}_l = 0,71$.

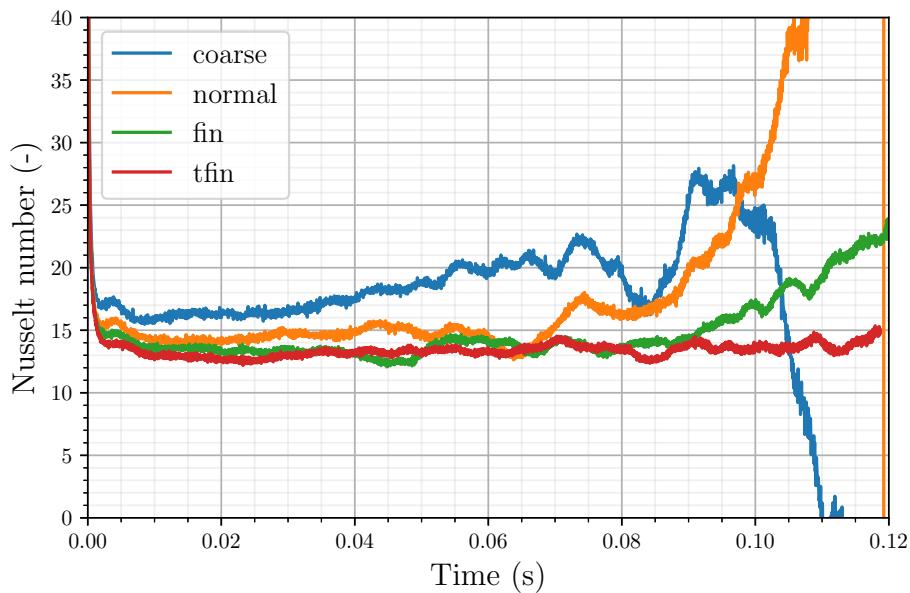


FIGURE 3.5 – Évolution du nombre de Nusselt au cours du temps pour $\text{Pr}_l = 0,71$ pour les différents maillages.

pas strictement d'une interpolation de RICHARDSON [76], qui est classiquement réalisée avec trois points, espacés exactement de la même manière. La méthode suppose une forme en loi puissance avec ordonnée à l'origine. Ne disposant pas de cette configuration, la supposition en loi puissance est gardée et l'interpolation déterminée avec la méthode complexe implémentée dans `curve_fit`.

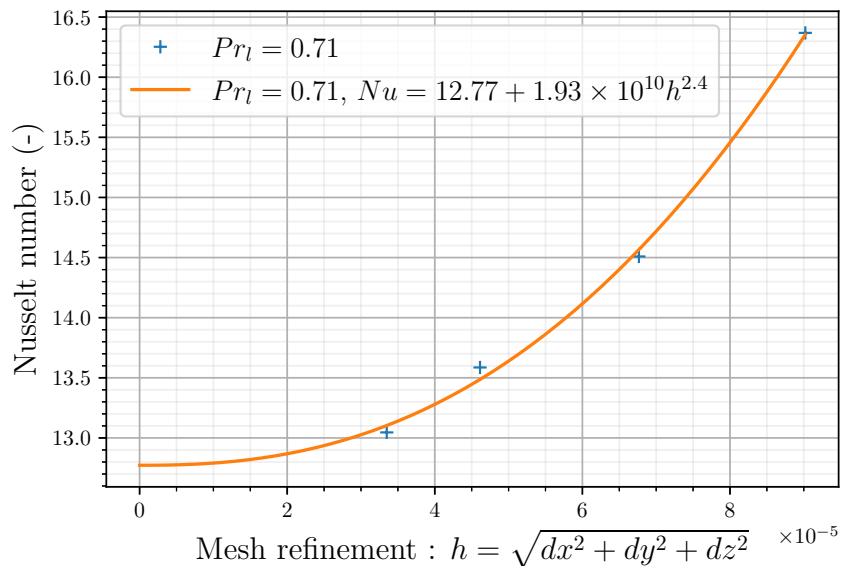


FIGURE 3.6 – Convergence du nombre de Nusselt en fonction de h pour une simulation à un nombre de Prandtl de 0,71.

Convergence selon le nombre de Prandtl La méthode présentée ci-dessus est appliquée pour tous les champs thermiques, et permet d'obtenir une valeur de $Nu|_{h=0}$ dans chacun de ces cas. La courbe de l'écart relatif du nombre de Nusselt entre le maillage très fin et l'interpolation en fonction puissance représentée Fig. 3.7 reste en dessous de 5% pour des nombres de Prandtl inférieurs à l'unité. Cette simulation est donc considérée convergée pour ces valeurs de nombre de Prandtl.

3.3 Étude en nombre de Prandtl à $Re = 400$

Les résultats présentés pour ce nombre de Reynolds sont tirés de la simulation réalisée avec le maillage le plus fin (maillage 4 Tab. 3.5). Ces résultats sont convergés à 5% pour ce nombre de Reynolds tant que le nombre de Prandtl reste

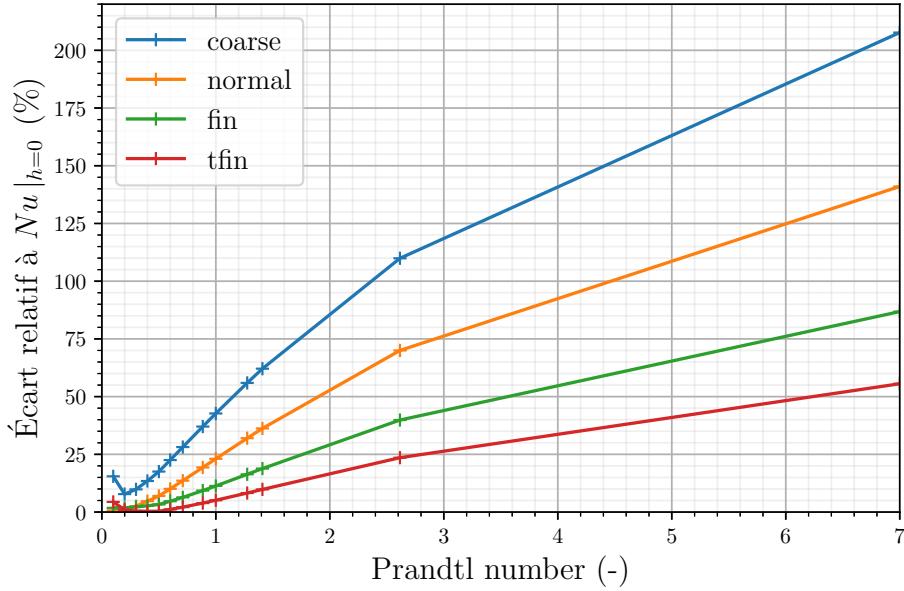


FIGURE 3.7 – Écart relatif entre le nombre de Nusselt moyen mesuré et le nombre de Nusselt limite quand $h = 0$.

inférieur à l'unité, comme cela est montré Sec. 3.2. Les paramètres géométriques, de la dynamique et de la thermique sont ceux présentés en Sec. 3.1.

3.3.1 Vue d'ensemble

La Fig. 3.8a permet de visualiser une coupe du champ de température. Les bulles sont caractérisées par la présence d'un point chaud par rapport au liquide environnant. Les bulles à ce nombre d'Eötvös prennent une forme ovale. Le champ thermique visualisé est le numéro 2 sur la Tab. 3.4. Cela correspond à un nombre de Prandtl égal à 2,60. Ce n'est pas celui le mieux résolu, mais il s'agit de celui où la turbulence des sillages est la mieux visible via le champ de température. La Fig. 3.8b représente le même champ thermique, mais avec la température post-traitée aux interfaces. C'est la moyenne de cette valeur qui est utilisée pour obtenir la température interfaciale décrite Sec. 3.3.5. L'obtention de cette température interfaciale à partir des températures monofluides sur la grille Eulérienne est décrite Sec. 6. La Fig. 3.8b met en évidence que sans saut de propriétés thermiques à l'interface, la température interfaciale varie d'une bulle à l'autre et à la surface d'une même bulle. De plus, des variations de température importantes sont présentes dans les bulles, dues à une perte par diffusion importante accélérée par la convection interne et externe. Des tourbillons de circulations peuvent en effet être

repérés dans chaque bulle. Cette figure montre aussi la tendance des bulles à former un cluster dans ces conditions, comme cela a déjà été montré par CLUZEAU et al. [20].

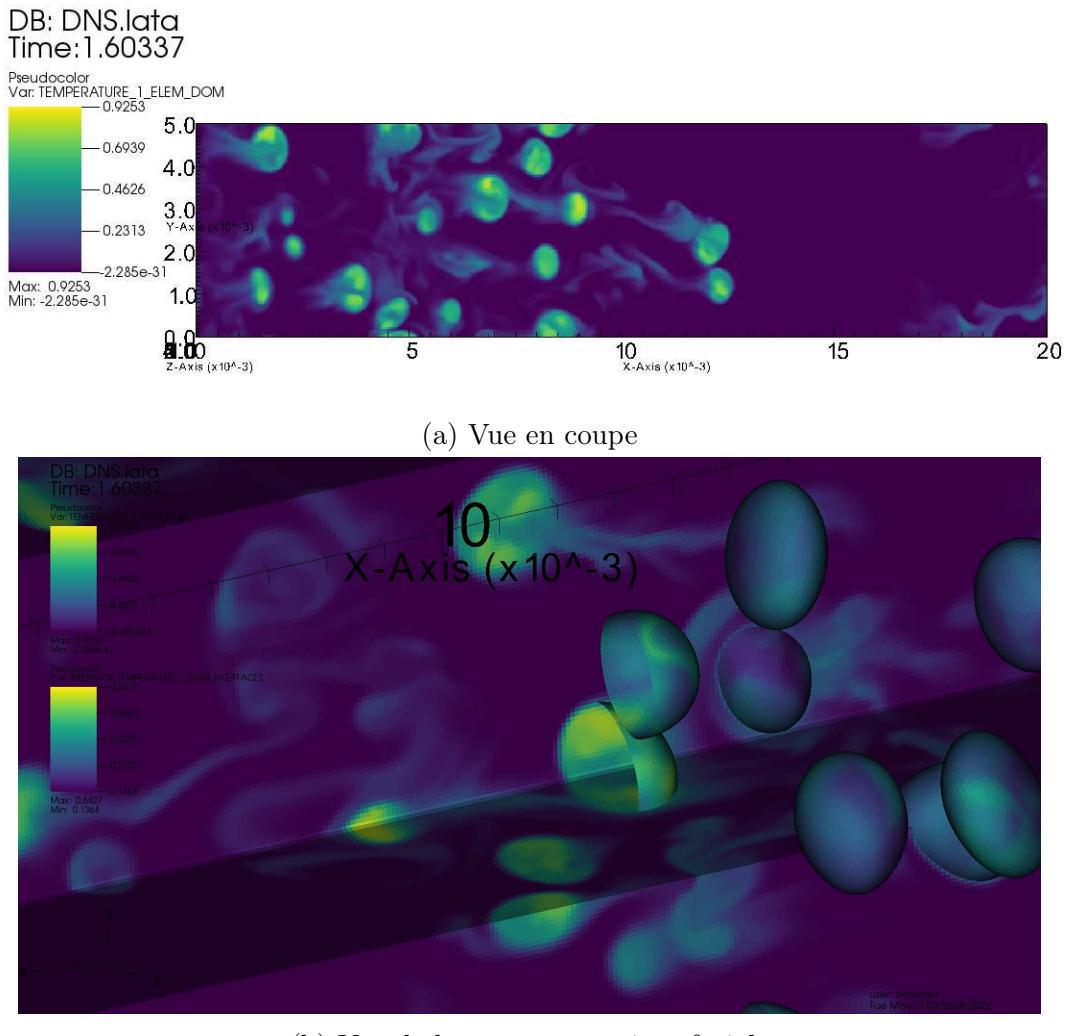


FIGURE 3.8 – Répartition de la température dans un essaim de bulles

Le graphique Fig. 3.9 représente les évolutions des températures moyennes de chaque phase au cours du temps, ainsi que celles de l'interface. La température interfaciale décroît au cours du temps, suivant le comportement de la température moyenne de la phase vapeur. Au contraire, la température moyenne de la phase liquide augmente de manière à ce que l'énergie thermique totale contenue dans le domaine soit conservée.

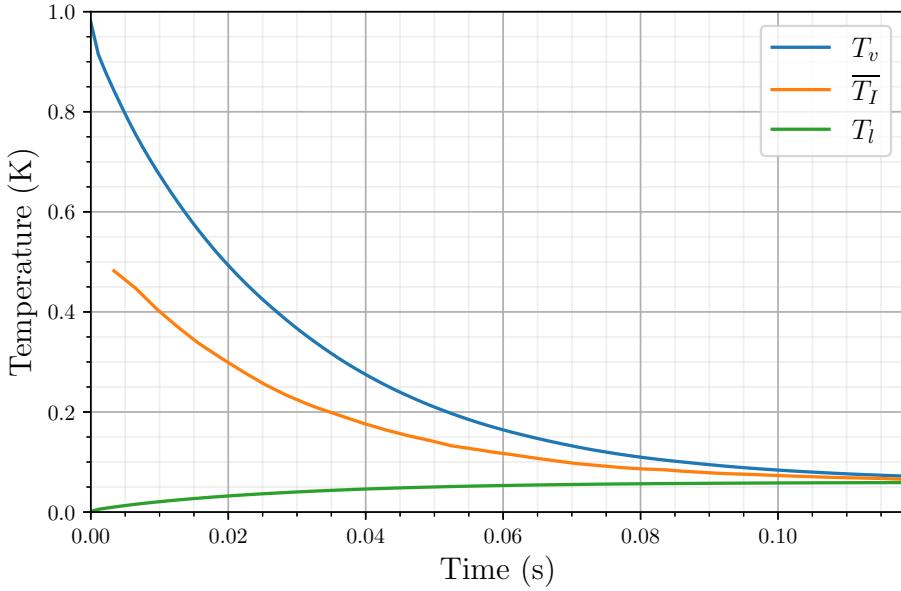


FIGURE 3.9 – Températures moyenne de la phase vapeur, de la phase liquide, et de l’interface au cours du temps pour la simulation à nombre de Prandtl liquide de 0,71.

3.3.2 Invariance par adimensionnement

Afin de vérifier que la simulation numérique n'est pas sensible à l'invariance $(\lambda, \rho c_p) \rightarrow (a\lambda, a\rho c_p)$ avec a une constante réelle quelconque, une deuxième simulation est réalisées avec $a = 10$ par rapport à une référence. La simulation de référence est le champ thermique numéro 9. Le champ numéro 14, utilisant les propriétés renseignées en Tab. 3.6 est supposé donner des résultats identiques. En effet, l'équation sans saut de propriétés thermiques s'écrit :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla \cdot T\underline{v} + \frac{\lambda}{\rho c_p} \nabla \cdot \nabla T, \quad (3.20)$$

avec T et \underline{v} des variables monofluides. La Fig. 3.10 montre bien que cette invariance est respectée. En effet, les courbes de température par phase se superposent parfaitement pour ces deux cas.

3.3.3 Nombre de Nusselt global

Une évolution de l'écart de température en loi puissance L'évolution au cours du temps de la température pour les différents champs thermiques est tracée

n°	λ $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	c_p $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	
		Liquide et vapeur	Liquide Vapeur
9	0,10	$1,42 \times 10^2$	$1,90 \times 10^3$
14	1,00	$1,42 \times 10^3$	$1,90 \times 10^4$

TABLEAU 3.6 – Paramètres thermiques utilisés pour la validation de l'invariance par adimensionnement.

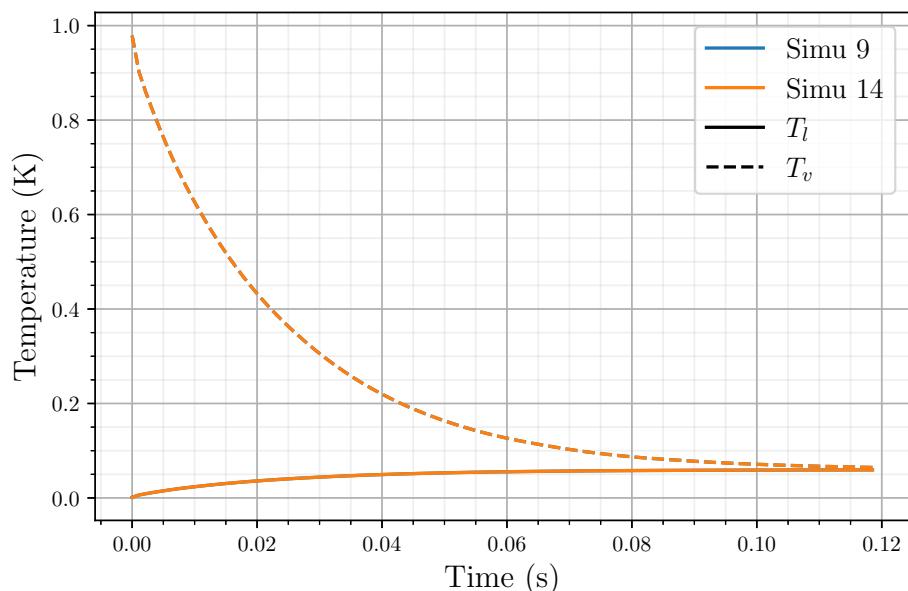


FIGURE 3.10 – Superposition des courbes d'évolution de la température pour des simulations à différentes propriétés thermiques à $\text{Pr}_l = 0,50$.

Fig. 3.11 en échelle logarithmique. Cette courbe est d'abord une droite dans cette échelle, puis les imprécisions de calcul deviennent trop grandes devant l'écart entre les températures moyennes de chaque phase. Deux seuils sont fixés. Un seuil en temps à un moment qui correspond au début de la partie linéaire en échelle logarithmique pour tous les champs thermiques. Ce seuil est aussi représenté Fig. 3.13 où son intérêt est mieux visible. Le deuxième seuil dépend du champ thermique et est déterminé comme étant le premier moment où l'écart de température moyenne entre les phases passe sous $2,00 \times 10^{-2}$ K. Cette température a été choisie arbitrairement de sorte que pour tous les champs de température l'écart de température au cours du temps suive une loi exponentielle (linéaire en échelle logarithmique). L'évolution en loi puissance de l'écart de température en fonction du temps se

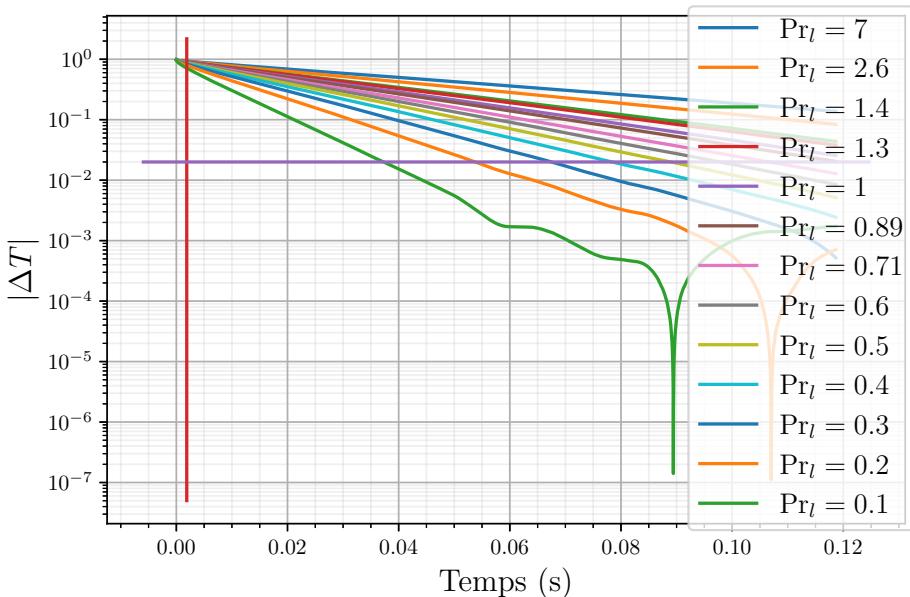


FIGURE 3.11 – Évolution au cours du temps de ΔT la différence entre la température moyenne de la vapeur et du liquide pour différents nombres de Prandtl.

retrouve en supposant que le nombre de Nusselt est constant au cours du temps. En effet, en écrivant le système suivant :

$$\rho_l c_{pl} V_l \frac{dT_l}{dt} = -Q_{l \rightarrow v}, \quad (3.21)$$

$$\rho_v c_{pv} V_v \frac{dT_v}{dt} = -Q_{v \rightarrow l}, \quad (3.22)$$

avec $Q_{l \rightarrow v}$ le flux thermique de la phase liquide vers la phase vapeur, et $Q_{v \rightarrow l}$ le contraire qui prend un signe opposé (pas de changement de phase). La différence

entre Éq. (3.21) et Éq. (3.22) donne :

$$\frac{d(T_v - T_l)}{dt} = \left(\frac{1}{\rho_v c_{p_v} V_v} + \frac{1}{\rho_l c_{p_l} V_l} \right) Q_{l \rightarrow v}. \quad (3.23)$$

Et en injectant l'écriture du nombre de Nusselt $Nu = \frac{Q_{v \rightarrow l} D_b}{\lambda_l \Delta T}$, présentée Éq. (3.16),

$$\frac{d\Delta T}{dt} = - \left(\frac{1}{\rho_l c_{p_l} V_l} + \frac{1}{\rho_v c_{p_v} V_v} \right) \frac{Nu \lambda_l}{D_b} \Delta T, \quad (3.24)$$

avec $\Delta T(t) = T_v(t) - T_l(t)$. Cette équation est une équation aux dérivées ordinaires du premier ordre dont la solution est une fonction exponentielle,

$$\Delta T = A e^{-\frac{Nu \lambda}{D_b} \left(\frac{1}{\rho_l c_{p_l} V_l} + \frac{1}{\rho_v c_{p_v} V_v} \right) t}. \quad (3.25)$$

L'écart de température mesuré suivant cette loi, cela montre bien que le nombre de Nusselt est constant au cours du temps.

Relation affine entre la température d'une phase et l'écart entre les deux phases La figure Fig. 3.12 permet de constater que quelles que soient les propriétés thermiques utilisées dans la simulation, la variation de la température de l'une des phases, la phase liquide par exemple, en fonction de l'écart de température entre les phases est linéaire. Il est normal que ces droites soient identiques, car l'une des extrémités correspond au temps initial de la simulation, commun à tous les champs thermiques, avec un écart de température de 1 et une température de la phase liquide égale initialement à 0. L'autre extrémité est déterminée par la situation finale. L'ordonnée est la température finale, qui dépend uniquement du taux de vide dans la mesure où les capacités thermiques sont identiques dans les deux phases (voir Éq. (3.28)), et abscisse est l'écart de température entre les phases qui est nul au bout d'un temps long. Cette variation strictement linéaire entre ces deux points s'interprète par la possibilité d'adimensionner l'équation par l'écart de température entre les phases. S'il semble assez naturel de le faire avec une constante comme cela est expliqué en Sec. 3.1, il n'était pas évident que ce soit possible avec un écart de température qui est fonction du temps. Cet adimensionnement peut s'interpréter comme le fait que l'équation de l'énergie est une équation aux dérivées partielles d'ordre 1 en temps. Il n'y a donc pas d'influence de la dérivé temporelle de la température initiale sur la solution. En effet, si la simulation est arrêtée puis reprise, seule la température est utilisée pour la reprise et non sa dérivée. Cette écart de température moyen peut donc être employé au moment de cette reprise fictive de simulation pour adimensionner l'équation. L'opération pouvant être reproduite à tout instant, cela nous donne bien la pos-

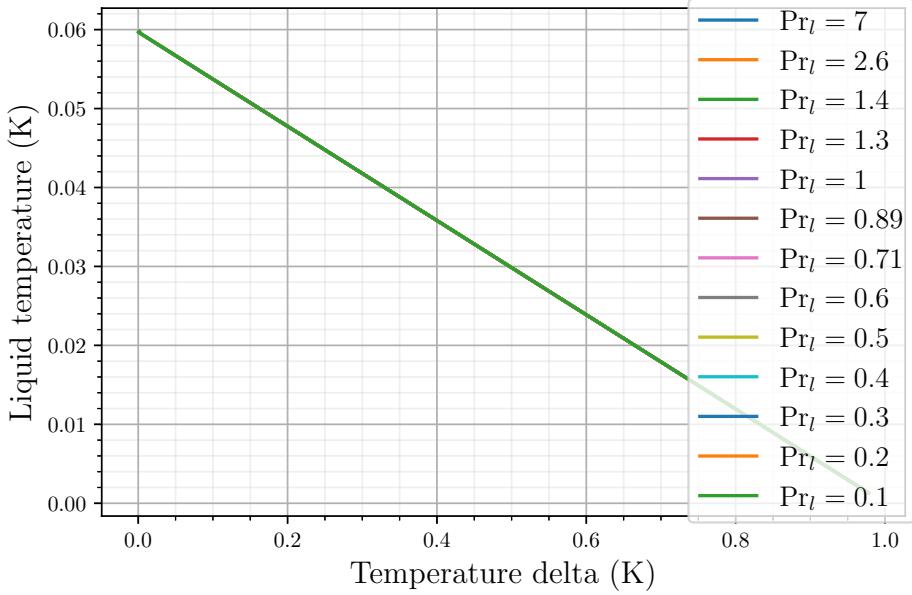


FIGURE 3.12 – Évolution de la température moyenne du liquide en fonction de la différence moyenne de température pour différents nombres de Prandtl.

sibilité d'adimensionner par l'écart de température moyenne de chaque phase au cours du temps. La température de chaque phase s'écrit donc comme une fonction affine de cet écart de température. Donc,

$$T_l = a\Delta T + b, \quad (3.26)$$

$$= (T_{l_0} - T_f) e^{-\left(\frac{1}{\rho c_{pl} V_i} + \frac{1}{\rho c_{p_v} V_v}\right) \frac{N_u \lambda_l}{D_b} t} + T_f, \quad (3.27)$$

avec T_f la température finale de mélange,

$$T_f = (\alpha \rho c_{p_v} T_{v_0} + (1 - \alpha) \rho c_{pl} T_{l_0}) / (\alpha \rho c_{p_v} + (1 - \alpha) \rho c_{pl}) = \alpha \quad (3.28)$$

dans ce cas. Il en est de même pour la température de l'autre phase.

Moyenne du nombre de Nusselt au cours du temps Une autre manière de déterminer le nombre de Nusselt associé au champ thermique simuler est de moyenner en temps le nombre de Nusselt évalué instantanément. Pour cela il est calculé à partir de $\frac{dT_l}{dt}$ et $\Delta T(t) = T_v - T_l$ par la formule Éq. (3.16). La Fig. 3.13 montre que le nombre de Nusselt est bien constant au cours du temps après un court instant d'établissement et jusqu'au phénomène de bruitage de l'écart de température entre les phases.

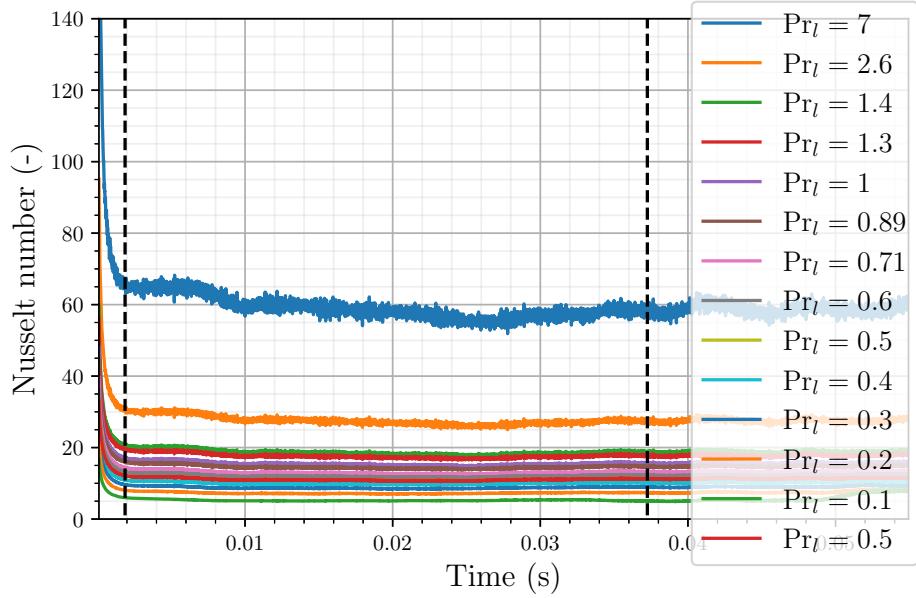


FIGURE 3.13 – Évolution du nombre de Nusselt en fonction du temps pour différents nombres de Prandtl.

Mise en regard des deux méthodes Les deux méthodes sont comparées Fig. 3.14. Une droite correspondant à des résultats identiques ($x = y$) est utilisée comme référence. Les résultats obtenus, quel que soit le nombre de Prandtl associé à la simulation, sont situés de manière quasiment indistincte sur cette droite. Cela montre que les deux méthodes sont équivalentes. Dans la suite, la deuxième méthode — celle de la moyenne directe du nombre de Nusselt instantané — est utilisée.

3.3.4 Modèles de nombre de Nusselt de la littérature

Un intérêt des simulations réalisées dans le cadre de cette thèse, est de déterminer des corrélations de transferts thermiques dans les écoulements diphasiques à bulles. Le cas d'application visé est le régime d'ébullition nucléée. Ce cas est malheureusement peu décrit dans la littérature, que ce soit expérimentalement ou numériquement. L'absence de corrélations purement expérimentales s'explique très bien par les conditions difficiles de mesure de température aux petites échelles, localisées à l'interface, dans un écoulement turbulent bouillant. L'absence de simulation numérique DNS vient principalement de la complexité numérique et des ressources en terme d'heures de calcul nécessaires à ce type de simulation. Cependant des corrélations ont été établies dans des cas connexes ou similaires. Ces cas

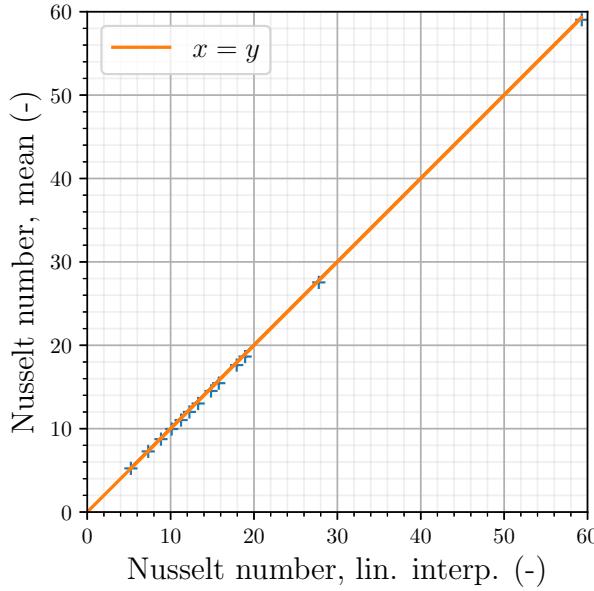


FIGURE 3.14 – Comparaison des nombres de Nusselt en fonction du nombre de Prandtl de la simulation, obtenus avec la méthode par moyenne temporelle et par régression linéaire de $\log |\Delta T| = f(t)$.

sont présentés en Tab. 3.7. Le nombre de Péclet est noté $Pe = \text{Pr} \times Re$. Tout ces cas utilisent comme température de référence des particules une valeur constante. En effet, dans le cas des simulations de particules ou sphère, la température est fixée, et dans le cas de bulles, la température est celle de la saturation. La température de référence pour le liquide, nécessaire au calcul de l'écart de température pour le calcul du nombre de Nusselt, est une température à l'infini pour MICHAELIDES [61], RANZ et MARSHALL JR [75] et RUCKENSTEIN [77].

Ces différentes méthodes sont comparées aux résultats obtenus pour l'essaim Fig. 3.15. Un écart significatif est observé. Cependant l'évolution de la tendance est similaire, avec approximativement la même pente. Cette différence amène à se poser la question de la définition du nombre de Nusselt de transfert de chaleur entre les bulles et le liquide. Le nombre de Nusselt utilisé pour caractériser nos simulations d'essaims provient d'une différence de température entre les moyennes par phase de chaque phase. D'autre définition de température auraient pu être retenues. Par exemple, la température minimum dans le liquide pourrait servir de référence. Cependant, l'objectif applicatif reste l'utilisation dans un code Euler-Euler. Ainsi ce genre de référence n'est pas adapté. Cette démarche de recherche de la bonne définition du nombre de Nusselt est à mettre en parallèle avec celle de THIAM [89] qui travaille sur des transferts de chaleur dans le cadre d'écoulements

Corrélation	Catégorie	Données	Formule Nu
RANZ MARSHALL [75]	Goutte, évaporation	Expé., analytique	$2 + 0,60Re^{0,50}Pr^{0,33}$
RUCKENSTEIN [77]	Bulle, condensation	Expé., analytique	$\frac{2}{\sqrt{\pi}}Pe^{0,50}$
MICHAELIDES [61] pages 130–131	Sphère non- visqueuse	Simu. 2D-axi, analytique	$\begin{cases} \frac{2-r_\mu}{2}Nu_0 + \frac{4r_\mu}{6+r_\mu}Nu_2 & \text{si } r_\mu < 2, \\ \frac{4}{r_\mu+2}Nu_2 + \frac{r_\mu-2}{r_\mu+2}Nu_\infty & \text{sinon.} \end{cases}$
	Sphère visqueuse	Simu. 2D-axi, analytique	$Nu_0 = 0,65Pe^{0,50} \left(1,03 + \frac{0,61Re}{Re + 21} \right) + \left(1,60 - \frac{0,61Re}{Re + 21} \right),$ $Nu_2 = 1,41 + 0,64Pe^{0,43} (1 + 0,23Re^{0,29}) - 0,15Re^{0,29},$
	Sphère rigide	Expé., analytique	$Nu_\infty = 1,30 + 0,85Pe^{0,33} (1 + 0,23Re^{0,29}) - 0,18Re^{0,36}$ et $r_\mu = \frac{\mu_v}{\mu_l}$.

TABLEAU 3.7 – Corrélations du nombre de Nusselt pour des particules ou des gouttes dans la littérature.

chargés en particules. Il montre que dans sa configuration le nombre de Nusselt qui correspond aux résultats expérimentaux doit être défini à partir d'une température moyennée avec une pondération par la vitesse axiale.

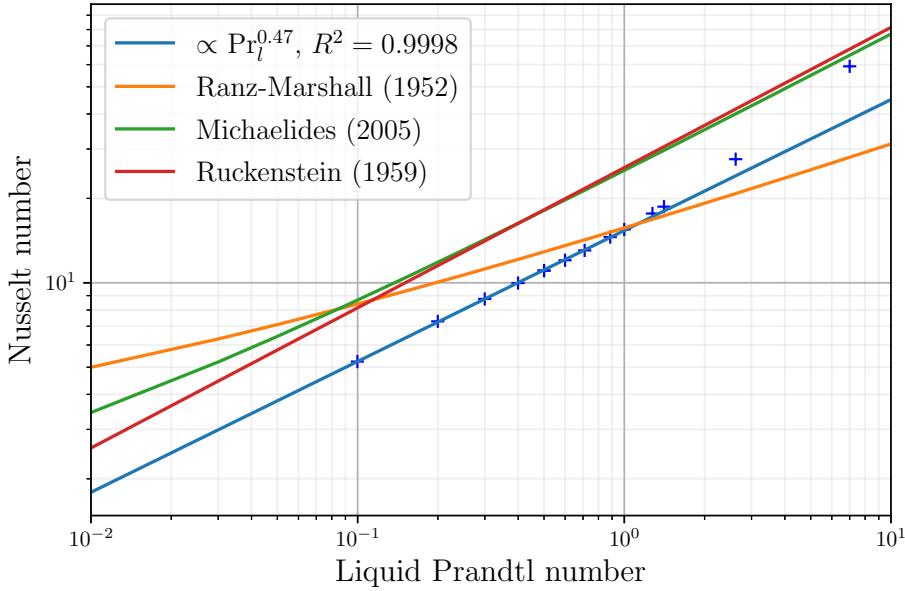


FIGURE 3.15 – Comparaison des différents modèles de l'évolution du nombre de Nusselt en fonction du nombre de Péclet en échelle logarithmique pour une simulation à un nombre de Reynolds de 521.

3.3.5 Nombre de Nusselt liquide

Le nombre de Nusselt global présenté Éq. (3.16), bien qu'utile notamment pour la simulation Euler-Euler, ne permet donc pas la comparaison aux corrélations présentées Sec. 3.3.4. En effet, celles-ci sont faites en utilisant une différence de température constante, avec une température des particules ou bulles imposée et constante et une température du fluide prise à l'infini, constante aussi. Cela ne correspond donc pas au cas de l'essaim de bulle homogène. La solution retenue pour avoir des nombres de Nusselt comparables est d'utiliser la différence non pas entre les températures des deux phases, mais entre la température moyenne de la phase liquide et la température moyenne de l'interface. L'évolution de cette différence est tracée sur la Fig. 3.16. L'écart est décroissant et tend vers zéro. Ce nombre de Nusselt utilisant plutôt la température d'interface des bulles que la température moyenne de la phase vapeur est appelé nombre de Nusselt liquide. En effet, il ne prend en compte que les transferts entre l'interface des bulles et le

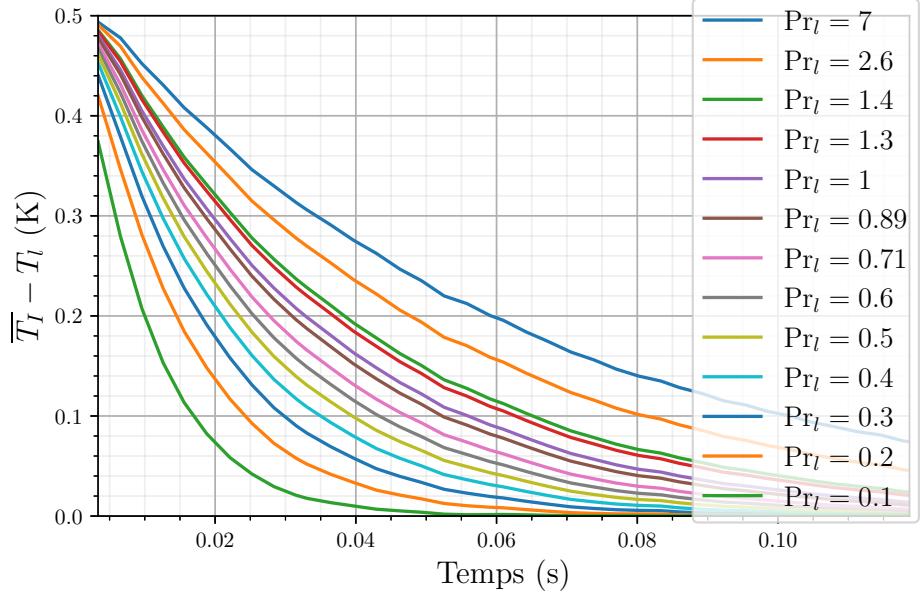
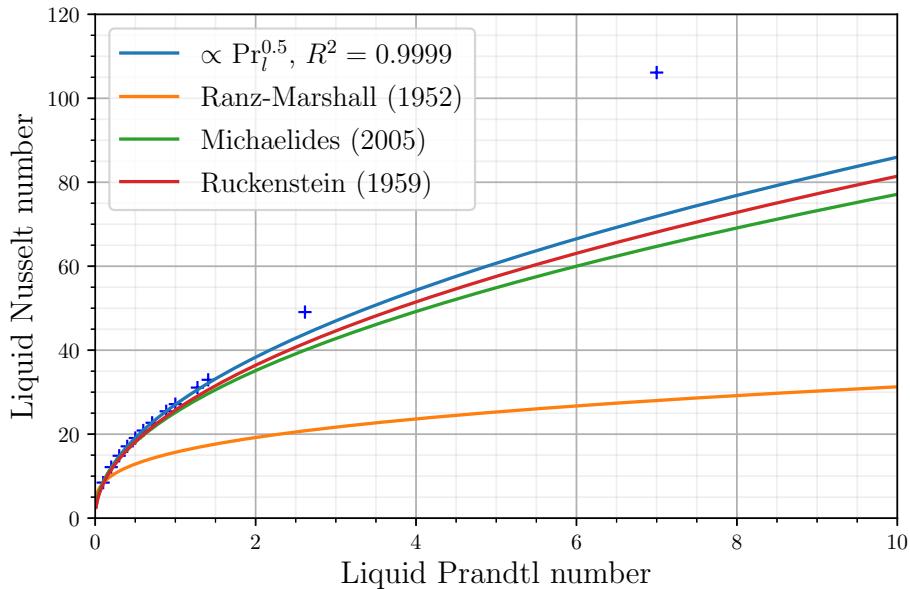


FIGURE 3.16 – Évolution au cours du temps de l'écart entre la température liquide moyenne et la température moyenne à l'interface pour des simulations à différents nombres de Prandtl.

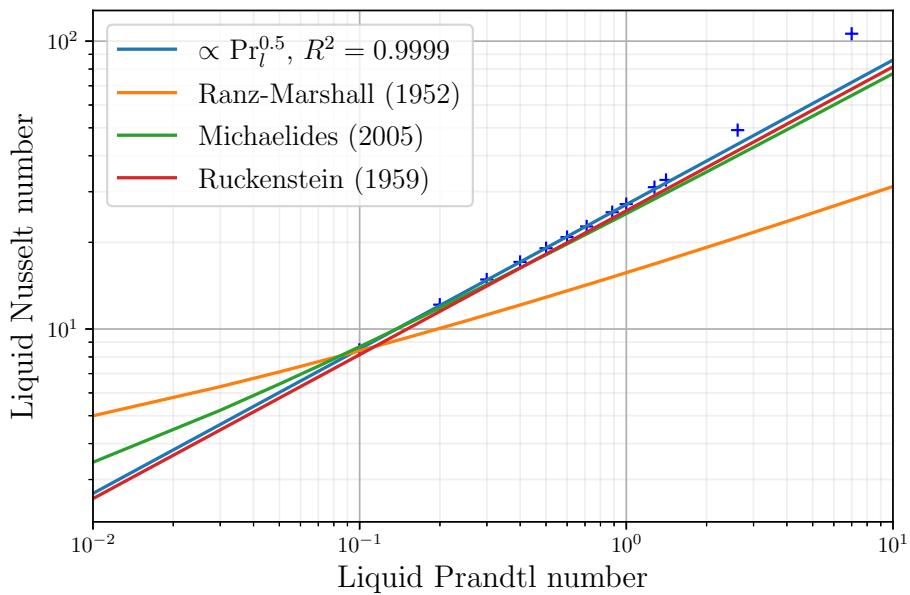
liquide. Il s'écrit

$$Nu_l = \frac{Q_{l \rightarrow v} D_b}{\lambda_l (T_I - T_l)}, \quad (3.29)$$

avec $Q_{l \rightarrow v} = Q_{I \rightarrow v} = -Q_{v \rightarrow l}$ car il n'y a pas de changement de phase et que l'interface n'a pas de capacité thermique propre. Ce nombre de Nusselt liquide est comparé Fig. 3.17 en échelle linéaire et en échelle logarithmique avec les différents modèles de la littérature présentés en Sec. 3.3.4. Les résultats de simulation s'accordent très bien avec les corrélations de RUCKENSTEIN [77] et MICHAELIDES [61]. Pourtant les corrélations de ceux-ci sont réalisées avec une seule bulle et ne prennent donc pas en compte les effets d'essaim dans la turbulence. Cela est donc plutôt surprenant, l'une des explications possibles est la compensations de différents phénomènes. Dans la suite de l'étude les résultats de simulation seront comparés à la corrélation de MICHAELIDES car il s'agit de la corrélation la plus complète et la plus proche de l'essaim de bulles.



(a) En échelle linéaire



(b) En échelle logarithmique.

FIGURE 3.17 – Comparaison des différents modèles de l'évolution du nombre de Nusselt en fonction du nombre de Prandtl en échelle logarithmique pour une simulation à un nombre de Reynolds de 521. Régression logarithmique pour $\text{Pr}_l \leq 1,00$.

3.3.6 Utilisation d'une interpolation type Richardson pour le nombre de Nusselt liquide

Ici les données utilisées pour la mise en place de la corrélation ne sont plus celles mesurées sur le maillage très fin, mais celles interpolées à partir des 4 mesures sur les différents maillages. La méthode d'interpolation est décrite Sec. 3.2.2. Elle permet d'obtenir la courbe Fig. 3.18 du nombre de Nusselt liquide en fonction du nombre de Prandtl. Cette courbe donne des nombres de Nusselt plus faibles que ceux mesurés pour le maillage très fin. De plus, il semble que plus le maillage soit fin et moins la partie linéaire de la courbe est importante. Cela est confirmé par la Fig. 3.19. Une corrélation est déterminée à partir des données pour chaque maillage. La forme recherchée est celle d'une fonction puissance, avec une ordonnée à l'origine à zéro, puis à partir d'un certain seuil d'une fonction linéaire. La jonction est faite de manière à ce que la fonction de corrélation soit continue et dérivable. Plus le maillage est fin et plus le nombre de Prandtl critique à partir duquel la courbe est mieux approximée par une fonction affine est grand. Il semble encore une fois que pour le maillage très fin la simulation est bien résolue tant que le nombre de Prandtl est inférieur à l'unité. L'interpolation de Richardson pour le nombre de Nusselt permet même visiblement d'augmenter la plage de nombre de Prandtl pour laquelle l'interpolation en loi puissance est meilleure que l'interpolation en loi affine. Une deuxième observation peut être faite Fig. 3.19 : mieux la simulation est résolue et plus petit est le coefficient de puissance du nombre de Prandtl, avec une limite entre 0,52 et 0,53. Il n'est donc pas impossible qu'une résolution supérieure rapproche davantage ce coefficient du 0,50 classiquement utilisé parmi les diverses corrélations de la littérature. La corrélation obtenue est représentée Fig. 3.20. Elle est comparée à la corrélation de Michaelides pour les mêmes paramètres thermiques et dynamiques, ainsi que le même taux de vide. Sur la Fig. 3.20a, la partie pointillée représente la part linéaire de la corrélation, au-delà de $\text{Pr} = 1,48$. La partie précédente est fitée sur une fonction de la forme $Nu = Nu_0 + a \text{Pr}^b$. Dans ce cas-là les bornes imposées lors du fit sont $Nu_0 \geq 0$, $a \geq 0$ et $0,20 < b < 1,00$. Cela donne les résultats présents sur la Fig. 3.20a. Il est à noter que dans ce cas, la valeur de Nu_0 qui donne le moindre écart entre les points et la corrélation est $Nu_0 = 0,00$. Cependant des mesures plus proches de $\text{Pr} = 0,00$ sont nécessaires pour en déduire vraiment la valeur à l'origine. La corrélation de Michaelides s'autorise une plus grande complexité fonctionnelle étant donné qu'elle fait intervenir plusieurs puissances du nombre de Prandtl. Elle donne un nombre de Nusselt plus important pour des nombres de Prandtl inférieurs à 0,30 et inférieur au-dessus. En dessous d'un nombre de Prandtl de 0,30, les données observées s'accordent avec la corrélation sur une bulle unique. Dans ce cas en effet, la turbulence thermique est faible, et les interactions entre les sillages des bulles ne jouent pas. Au-delà de ce nombre de Prandtl, le transfert de chaleur dans l'essaim est plus rapide pour une

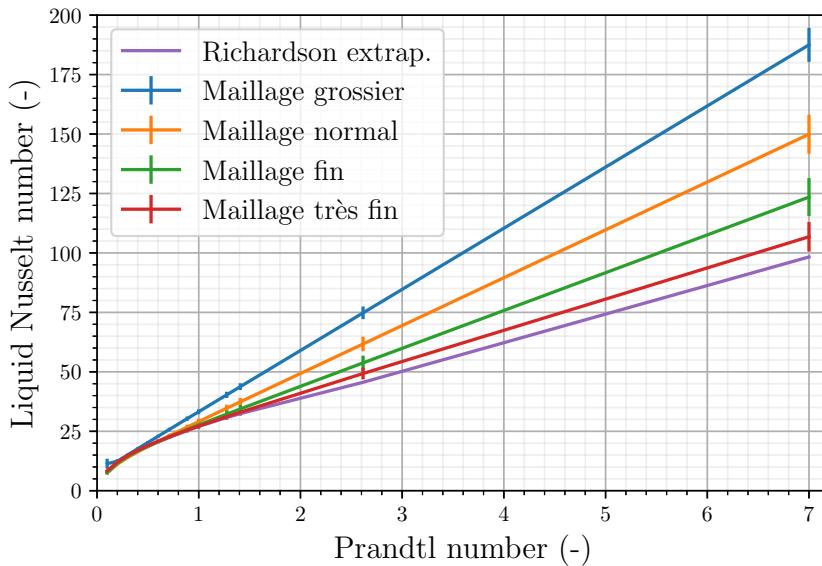


FIGURE 3.18 – Extrapolation de type Richardson pour estimer une courbe du nombre de Nusselt liquide en fonction du nombre de Prandtl à pas d'espace nul à $Re = 521$.

même différence de température et une même conductivité thermique que dans le cas de la goutte unique de MICHAELIDES. Cela peut s'interpréter par l'effet de la turbulence de sillages, qui vient légèrement accélérer les transferts en interagissant avec les autres bulles. Cela dit, pour ce régime cet effet est relativement faible.

3.4 Étude en nombre de Reynolds

Les différents nombres de Reynolds étudiés sont présentés en Tab. 3.2. Ces quatre nombres de Reynolds sont issus des simulations présentées dans la thèse de DU CLUZEAU [29]. Ainsi, les champs dynamiques sont repris tels qu'ils étaient à la fin des simulations présentées dans cette thèse. Ils sont donc tous établis. Les différents champs thermiques sont ajoutés à un instant t avec une température égale à 1,00 dans les bulles et à 0,00 en dehors. Des études similaires à celle présentée précédemment sont réalisées, en maillage et nombre de Prandtl. Les résultats sont présentés uniquement pour le maillage le plus fin plutôt que sur tous les maillages par souci de synthèse, et plutôt que sur l'interpolation de Richardson car le maillage très fin est considéré comme étant convergé.

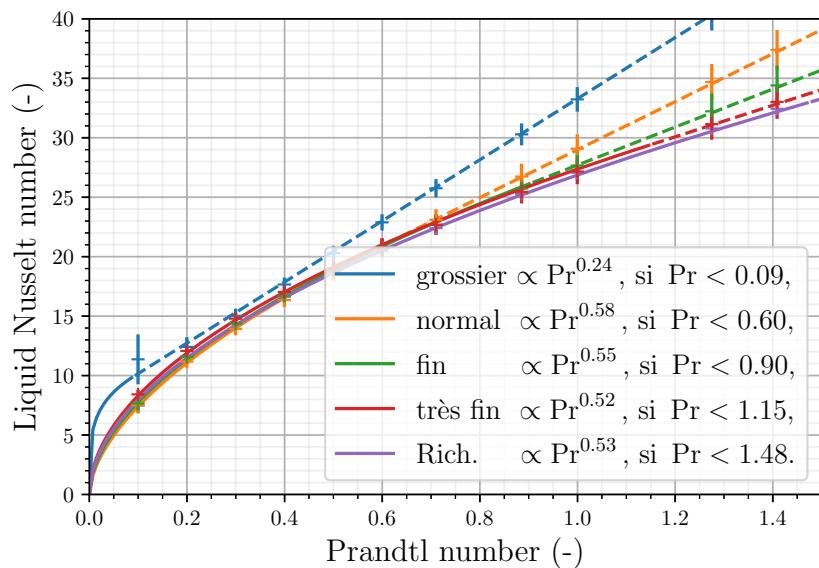
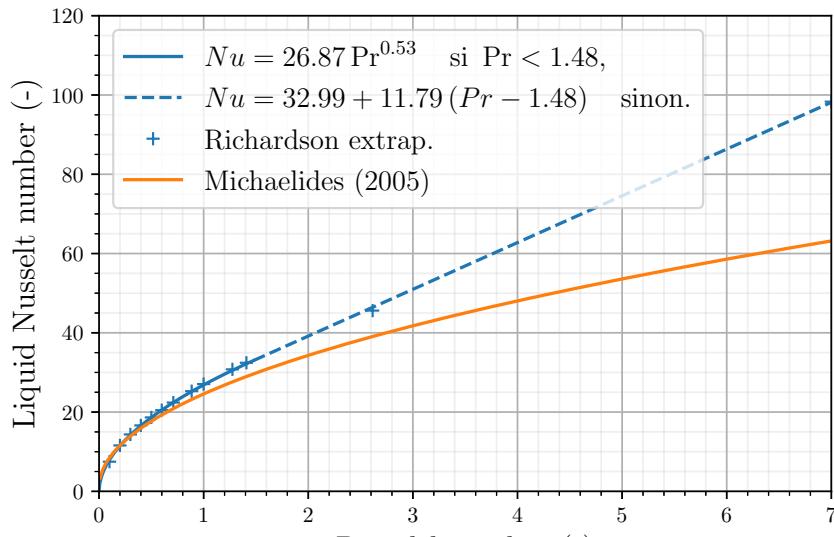
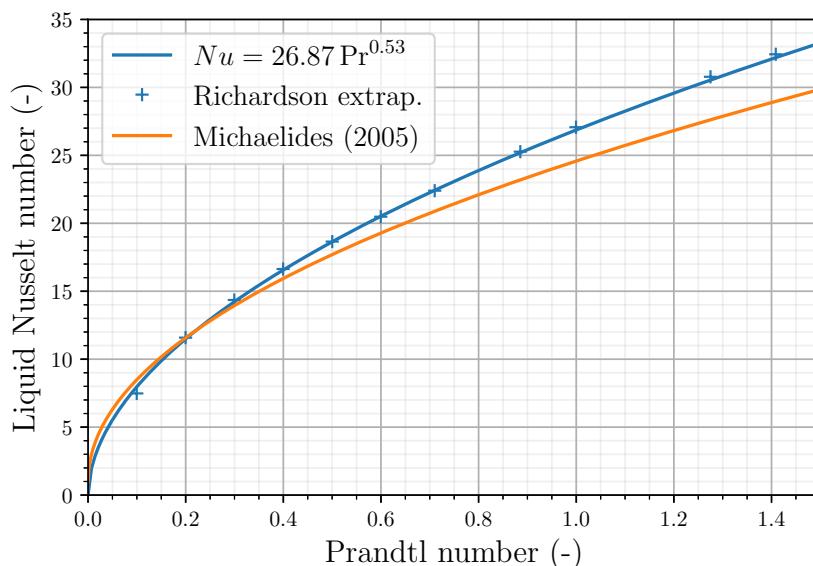


FIGURE 3.19 – Modélisation en loi puissance pour les différents maillages et l’interpolation à pas d’espace nul. En trait plein la partie exponentielle, en pointillés la partie affine. La hauteur des croix représente 2 écarts-types des variations temporelles.



(a) Vue d'ensemble.



(b) Zoom sur la partie en loi puissance.

FIGURE 3.20 – Corrélation de l'évolution du nombre de Nusselt liquide en fonction du nombre de Prandtl à partir des données interpolées à un pas d'espace nul, comparaison aux corrélations principales de la littérature.

3.4.1 Des champs dynamiques différents

L'évolution temporelle du nombre de Reynolds au cours du temps est représentée Fig. 3.21. Ils sont donc tous un peu supérieurs aux valeurs visées en connaissant le rapport des viscosités. Une tendance se dégage, plus le nombre de Reynolds est important et plus la variabilité en temps est grande.

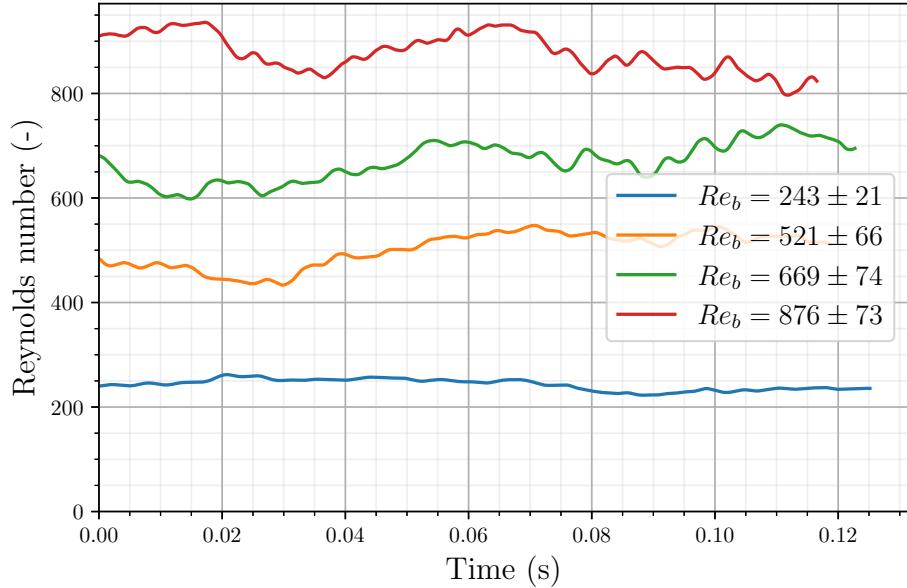


FIGURE 3.21 – Évolution du nombre de Reynolds au cours du temps pour les quatre nombres de Reynolds simulés sur le maillage le plus fin. L'incertitude représente deux écarts-types.

3.4.2 Des champs thermiques différents

Les résultats de l'évolution du nombre de Nusselt en fonction du nombre de Prandtl selon le nombre de Reynolds de la simulation sont présentés Fig. 3.22. Cette courbe montre que les résultats semblent très dépendant du nombre de Reynolds. Et en toute logique, plus le nombre de Reynolds est important et plus les transferts sont rapides pour un même nombre de Prandtl. Il semble aussi que plus le nombre de Reynolds de la simulation est élevé et plus vite la courbe est linéaire. Cela signifie que la résolution du maillage est plus vite limitante pour des nombres de Reynolds plus élevés. Il reste donc à trouver une loi de dépendance au nombre de Reynolds.

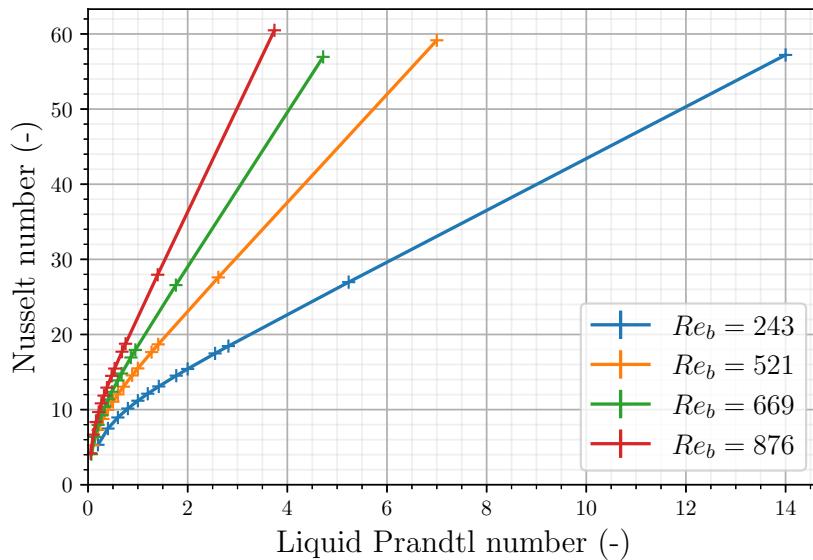
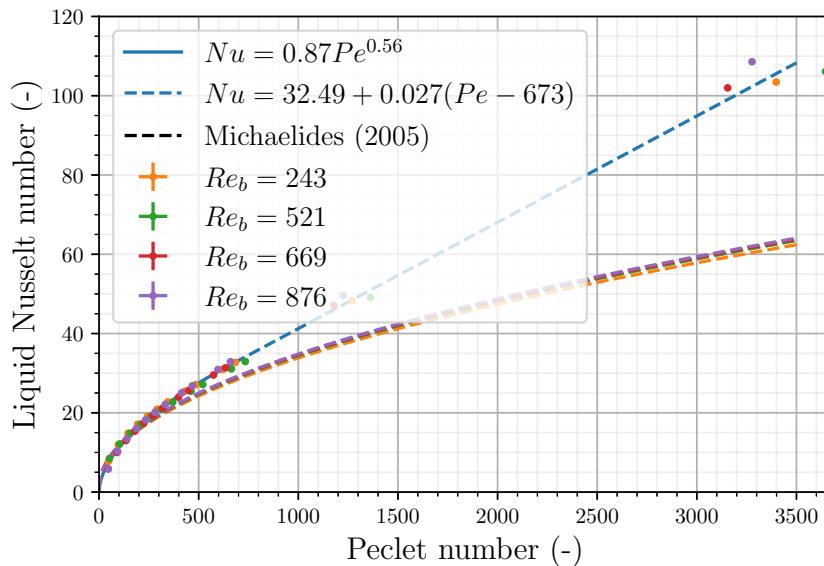


FIGURE 3.22 – Nombre de Nusselt en fonction du nombre de Prandtl pour différents nombres de Reynolds simulés. La hauteur des croix matérialise les deux écarts-types de variabilité temporelle.

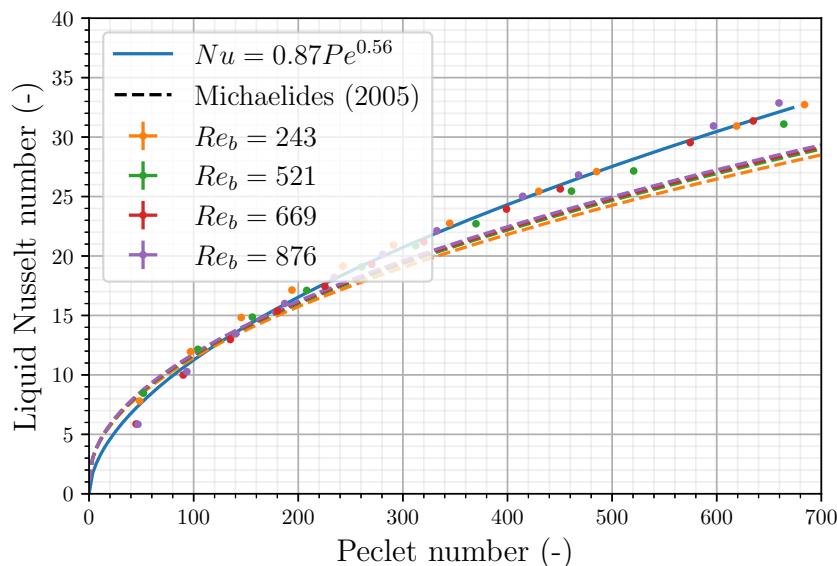
3.4.3 Une dépendance du nombre de Nusselt au nombre de Péclet

En traçant Fig. 3.23a le nombre de Nusselt en fonction du nombre de Péclet, les courbes se superposent pour différents nombres de Reynolds. Le nombre de Péclet est donc le bon nombre adimensionné pour décrire les transferts thermiques dans ces conditions. L'incertitude sur le nombre de Péclet est due à sa dépendance au nombre de Reynolds, qui est moyenné en temps ($Pe = Pr \times Re$). Un fit d'une fonction en loi puissance du nombre de Péclet puis linéaire, utilisant la même méthode que celle décrite précédemment, est utilisé sur l'ensemble des données issues des différentes simulations, simultanément. La corrélation trouvée ainsi donne à nouveau une meilleure correspondance aux données pour un nombre de Nusselt à l'origine égal à zéro. La limite de résolution semble être autour d'un nombre de Péclet de 660. La puissance globale sur le nombre de Péclet est un peu plus grande que celle fittée pour le nombre de Prandtl avec les seuls résultats pour le nombre de Reynolds proche de 400, elle est de 0,55. La Fig. 3.23b compare les résultats pour la partie résolue à la corrélation de Michaelides. Celle-ci est représentée pour les quatre nombres de Reynolds correspondant à nos simulations. Une faible différence peut être observée entre les courbes issues de la corrélation

de MICHAELIDES, mais cet écart étant de l'ordre de grandeur de l'écart-type de mesure temporelle des nombres de Nusselt de ces simulations, il est impossible de constater cette tendance de dépendance au nombre de Reynolds dans les données issues des simulations. Le croisement de la corrélation de MICHAELIDES avec celle issue des données DNS se fait aux alentours de $Pe = 120$. Cependant, une certaine dispersion des mesures couplée à une incertitude relativement grande pour les simulations à faible nombre de Péclet ne permettent pas de décrire précisément les phénomènes dans ce régime. Avant cette limite, l'essaim a un nombre de Nusselt légèrement plus faible, mais qui correspond très bien avec ce qui est observé par MICHAELIDES. Cet écart augmente avec le nombre de Péclet.



(a) Figure complète, interpolation d'abord en loi puissance puis affine.



(b) Zoom sur la partie exponentielle de la Fig. 3.23a.

FIGURE 3.23 – Nombre de Nusselt mesuré en fonction du nombre de Péclet de la simulation, comparé aux prédictions du modèle de Michaelides. La taille des croix, en largeur et hauteur représente deux écarts types de la variabilité en temps de la valeur.

Conclusions

Résumé du chapitre

Les simulations en essaims décrites dans ce chapitre ont permis de montrer plusieurs points :

- La simulation DNS 3D avec front-tracking et schéma VDF est pertinente pour simuler ce type d'écoulement complexe.
- La différence de température entre les phases est le bon critère pour adimensionner l'équation de la chaleur résolue ici.
- La corrélation de Michaelides est utilisée comme comparaison à nos résultats, malgré des différences fondamentales au cas expérimenté.
- Au-delà d'un nombre de Prandtl correspondant à une faible turbulence thermique, les transferts sont plus importants (8% à $\text{Pr}_l = 1$) pour l'essaim que pour le cas de Michaelides.
- Dans ces gammes de nombres de Reynolds, le nombre de Nusselt dépend essentiellement du nombre de Péclet.
- Les corrélations sur des gouttes de la littérature sont proches des corrélations pour un essaim, particulièrement pour $Pe < 300$. Au-delà une intensification des transferts de l'ordre de 10 à 15% semble se produire dans ces essaims à 6% de taux de vide.
- Une corrélation sur un maillage convergé valable sur la plage $Re_b \sim 200 - 800$ et $Pe \sim 50 - 660$ pour un essaim de bulles à $\alpha = 6\%$ et sans saut de propriétés thermiques a été obtenue :

$$Nu = 0.88Pe^{0.55}, \quad (3.30)$$

valide sur une large gamme de nombre de Reynolds ($\sim 200 - 800$) pour un taux de vide de 6% et un rapport de propriétés thermiques de 1,00. Ce rapport peut-être une raison pour laquelle le Peclet est suffisant dans la correlation. Il n'est pas impossible qu'un autre rapport influence les puissances en nombre de Prandtl et de Reynolds différemment.

Les perspectives pour la remontée d'échelle sont très prometteuses. Ces études pourraient être enrichies par une étude de la dépendance au taux de vide et surtout au rapport des propriétés thermiques entre les phases. En effet, la simulation d'une température non constante dans la phase vapeur change significativement les résultats par rapport aux cas présents dans la littérature. Pour cette raison, nous nous attachons dans la partie suivante à développer une méthode numérique fiable permettant de résoudre des écoulements avec des sauts de propriétés thermiques tout en conservant l'énergie thermique initialement contenue dans le domaine. D'autres grandeurs statistiques intéressantes comme le vecteur des fluctuations vitesse-température peuvent aussi être analysés en utilisant l'adimensionnement par l'écart de température pour observer des grandeurs statistiques.

Deuxième partie

Étude de schémas numériques pour
la conservation de l'énergie
thermique dans le cas de propriétés
discontinues

Chapitre **4**

FluidDyn : un code de simulation de transferts thermiques en une dimension

Sommaire du présent chapitre

4.1 Introduction	108
4.1.1 Description du problème physique résolu	108
4.1.2 Architecture générale du simulateur	109
4.1.3 Définition du jeu de données	111
4.1.4 La simulation à un instant donné, calcul des flux . .	113
4.1.5 Correction des flux à proximité de l'interface	114
4.1.6 La gestion temporelle d'une simulation	117
4.2 Validation du code	118
4.2.1 Ordres d'interpolation et de convergences	119
4.2.2 Le cas sans saut de propriété : pseudo-monophasique	128
4.3 Études de la formulation monofluide avec discontinuités	134
4.3.1 Étude de convergence numérique de la perte d'énergie	136
4.3.2 Études de l'influence respective des erreurs de convection et de diffusion sur la perte d'énergie	136
4.3.3 Étude de l'influence des paramètres physiques sur la perte d'énergie	141
Conclusions	146

4.1 Introduction

Face à la difficulté d'obtenir un schéma conservatif à partir de la formulation monofluide, mes recherches se sont portées sur la mise au point d'un tel schéma. Devant la diversité des discrétisations possible de l'équation de conservation d'énergie en diphasique, des multiples formulations et des schémas numériques utilisables à tester, il semblait essentiel de simplifier l'approche tri-dimensionnelle dans une première phase exploratoire. De plus, aucun outil existant ne semblait répondre au besoin présent de tester toutes ces configurations.

FluidDyn a ainsi été développé en Python dans l'objectif d'être capable de tester dans un cas simple unidimensionnel un grand nombre de manières de résoudre l'équation de la température. À cause de cette complexité d'options et d'algorithmes, un soin particulier est apporté à l'architecture logicielle de ce code orienté-objet. Dans les sous-parties suivantes, la configuration et l'architecture implémentée sont décrites et expliquées.

Ce code, bien qu'utilisé et écrit dans le cadre de simulations unidimensionnelles adopte finalement une architecture très générale qui va au-delà de la résolution de l'équation de la chaleur 1D. Cependant pour le moment il s'agit bien du seul cas applicatif. Il est donc présenté sous cet aspect unique.

4.1.1 Description du problème physique résolu

L'objectif de FluidDyn est d'évaluer des schémas numériques sur un problème à une dimension, similaire au problème qui est traité en trois dimensions. Pour cela, une configuration avec un domaine périodique de largeur L est imaginée. Ce domaine est maillé de manière régulière par des cellules de largeur Δx . Le centre de la première cellule se situe en $\Delta x/2$ et le dernier en $L - \Delta x/2$. Ainsi les cellules utilisées pour les schémas volumes finis couvrent tout le domaine. Les flux sont calculés pour réaliser notre schéma volume fini aux faces des cellules et les valeurs calculées représentant l'intégrale sur le volume de la cellule sont assimilées aux valeurs au centre des cellules.

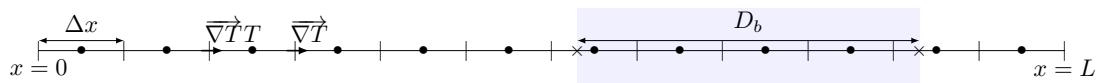


FIGURE 4.1 – Schéma du domaine 1D avec maillage cartésien et front-tracking de l'interface d'une bulle tel qu'il est implémenté dans FluidDyn

Dans ce domaine se déplacent une ou plusieurs bulles de même diamètre. Comme le problème est unidimensionnel, ce qui est appelé bulle ici est en réalité un segment de droite contenu dans notre domaine. Comme dans la simulation

tri-dimensionnelle, les bulles, qui sont représentées par deux marqueurs, sont advectées directement. Ainsi les marqueurs donnent la position exacte de l'interface comme en front-tracking tri-dimensionnel. En une dimension, l'incompressibilité du fluide mène à une vitesse uniforme sur tout le domaine, il n'y a donc ici aucune difficultés liées aux opérations de remaillage et de vérification de conservation du volume contrairement au cas 3D. La vitesse est choisie constante dans l'objectif de simuler des écoulements dans un état stationnaire. Il est aussi à noter qu'il n'y a pas de vitesse relative entre les phases en une dimension. La seule vitesse qui existe est la vitesse avec laquelle la bulle est convectée. Cette vitesse est choisie de sorte qu'elle corresponde aux vitesses terminales observées de la phase vapeur dans nos simulations d'essaim (environ 0.2 m/s). Toutes ces considérations n'ont rien de physique étant donné que par changement de référentiel n'importe quelle vitesse terminale peut être obtenue, elles sont faites sur la base de considération de résolution de schémas numériques. La vitesse de convection est en réalité un paramètre d'adimensionnement du système.

Dans ce domaine périodique avec des bulles se déplaçant à vitesse constante, une équation de température unidimensionnelle peut-être résolue. La température initiale est convectée et diffusée. Des flux convectifs et conductifs sont calculés en utilisant les températures des cellules, les propriétés des deux fluides, la vitesse constante et la position des interfaces. Les flux sont calculés aux faces des cellules de la discréétisation. Puis ils sont appliqués à la température de manière différente selon la formulation numérique retenue.

4.1.2 Architecture générale du simulateur

L'architecture générale permet de définir une simulation avec plusieurs objets de données, d'initialiser un état avec sa propre équation d'évolution et de le faire évoluer selon le schéma en temps choisi tout en post-traitant des statistiques et affichant les profils de température. Ainsi, la manière de définir une simulation et la manière de l'instancier pour un calcul sont séparées. De plus, le calcul est réalisé avec une séparation des objectifs. Le `StateProblem` implémente la discréétisation spatiale d'une équation. Les algorithmes d'évolution du problème sont séparés. Cette séparation permet d'obtenir une interface claire de l'évolution en temps de notre problème. Comme les évolutions en temps peuvent être différentes selon le schéma choisi (Euler, RK3), cela permet d'isoler cet algorithme et de simplifier l'écriture de l'équation d'évolution, qui est le vrai objet d'analyse de ce travail.

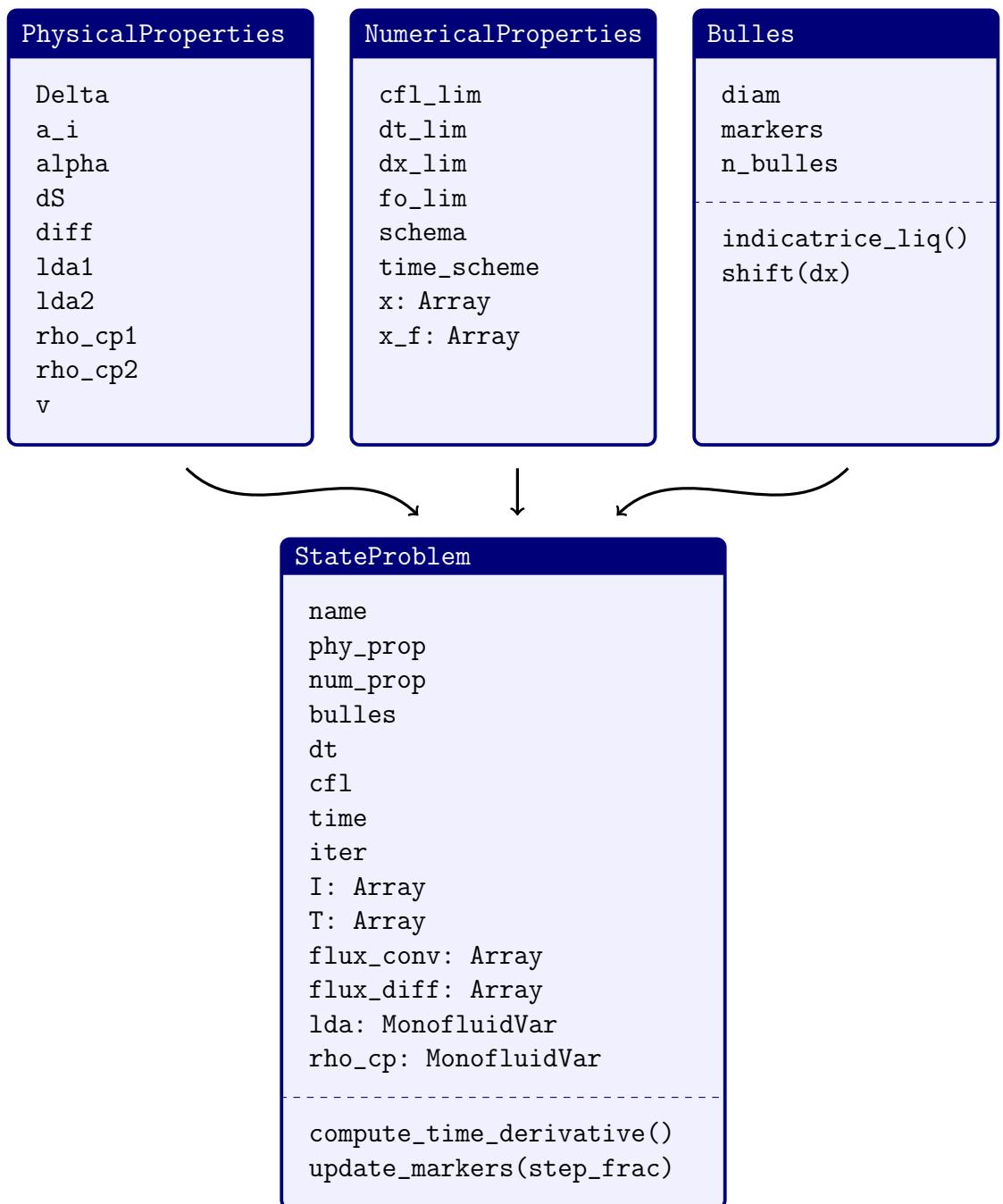


FIGURE 4.2 – Schéma de l’instanciation d’un `StateProblem` à partir de la définition du problème à résoudre.

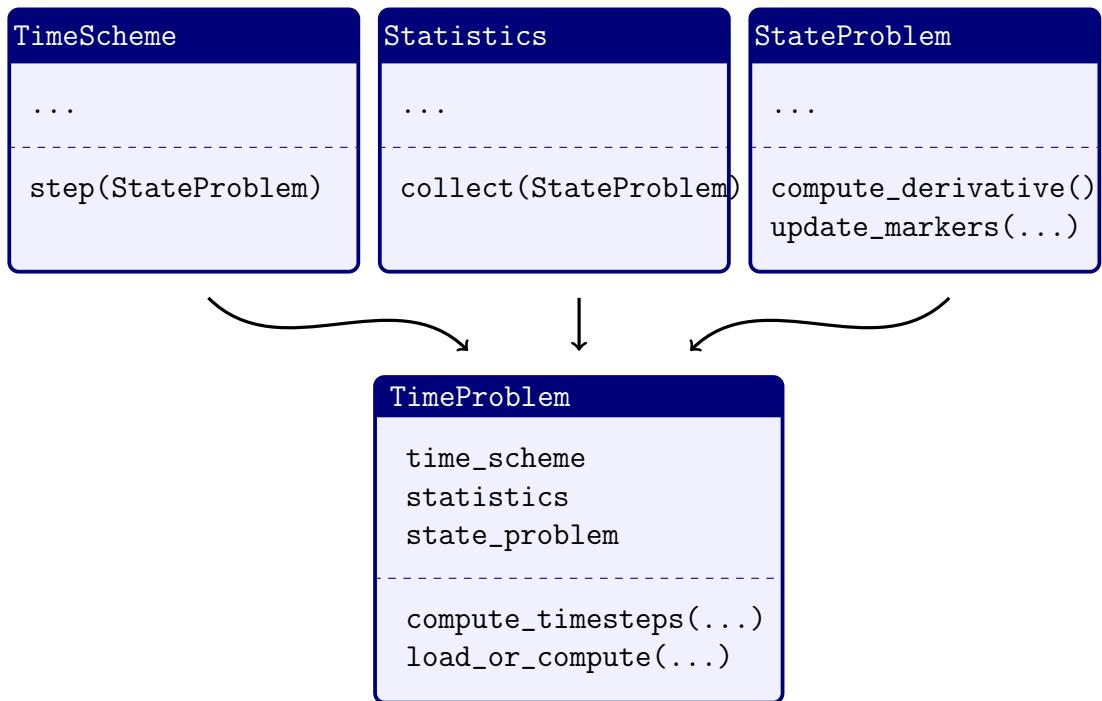


FIGURE 4.3 – Schéma de l’instanciation d’un `TimeProblem` à partir du schéma en temps choisi et de l’équation d’état définie avec sa discréétisation.

4.1.3 Définition du jeu de données

Plusieurs objets sont implémentés pour décrire une simulation et la lancer. Les deux premiers objets correspondent aux paramètres physiques et numériques de la simulation. Ils sont séparés dans le but de pouvoir lancer des simulations aux paramètres physiques identiques avec des paramètres numériques différents, sans risquer de modifier ces premiers. Ces classes sont essentiellement des classes de paramètres, un peu comme des dictionnaires.

PhysicalProperties La classe des paramètres physiques `PhysicalProperties` contient :

- la longueur du domaine L ,
- les conductivités thermiques λ du liquide et de la vapeur,
- les capacités thermiques massiques ρC_p des deux phases,
- la vitesse constante de convection,
- le taux de vide du domaine (fraction de taux de présence de bulle sur volume total),
- le coefficient de fraction surface volumique a_I , et la surface d’une face d’une cellule (dans les 2 autres directions que la direction décrite)

- et enfin si la simulation considère la diffusion ou si elle la néglige. Ce dernier paramètre, bien qu'étant un artefact de calcul donne bien lieu à la description d'un problème physique différent.

Ces paramètres sont choisis à partir du jeu de donnée qui sert à initialiser TrioCFD-IJK.

NumericalProperties La classe des paramètres numériques `NumericalProperties` comporte les informations suivantes :

- le pas d'espace Δx ,
- le nombre de Courant Friedrichs Lewy maximum,
- le nombre de Fourier maximum,
- le pas de temps Δt maximum,
- le schéma d'intégration en temps (Euler, RK3, RK4),
- le schéma de convection monofluide (upwind, QUICK, WENO),
- le schéma de diffusion monofluide (centré 2 harmonique, centré 2 arithmétique)
- et les éventuelles méthodes de correction des schémas à proximité de l'interface.

Il est important de noter que ces valeurs sont les valeurs maximum souhaitées de pas de temps, mais que le pas de temps réel de la simulation dépend de la vitesse de convection et des propriétés physiques des fluides (λ). Sa détermination est déléguée à la classe `StateProblem` qui connaît toutes les informations nécessaires à son calcul (Δx , CFL_{max} , schéma, ...).

Bulles Une classe `Bulles` est implémentée pour décrire les interfaces des bulles. Elle peut être initialisée de nombreuses manières différentes et contient un tableau des doublets des positions de chaque interface pour chaque bulle (une interface amont liquide vapeur et une interface aval vapeur liquide). Elle permet aussi de porter des champs à l'interface pour post-traitement (température, gradient, autre). Elle implémente une méthode qui calcule l'indicatrice sur toute la discrétisation du domaine, ainsi qu'une méthode qui déplace les bulles (et gère la périodicité du domaine). Cette classe est capable de gérer plusieurs bulles, avec des diamètres différents de manière transparente, mais la plupart du temps elle n'est utilisée que pour décrire une seule bulle. Comme les bulles sont représentées par des couples de marqueurs, il n'y a pas besoin d'avoir recours à des algorithmes de composante connexe compliqués pour savoir dans quelle bulle se situe une cellule.

4.1.4 La simulation à un instant donné, calcul des flux

La classe StateProblem

Définition et déclaration Cette classe est la base d'une simulation. Elle connaît toutes les informations relatives à une simulation et porte les champs sur le domaine. Elle est instanciée à partir d'un jeu de paramètres physiques, d'un jeu de paramètres numériques, d'une instance de `Bulles` et d'une fonction de température initiale. Cette classe décrit n'importe quelle simulation à un instant donné. Elle permet de calculer la dérivée temporelle de la valeur qu'elle contient (la température dans le cas classique, l'énergie éventuellement). Pour cela, elle détermine les différents termes de l'équation d'évolution. Les termes d'advection et de diffusion sont donc calculés dans cette classe. Par défaut les flux convectifs et diffusifs sont calculés à l'aide d'opérateurs QUICK et Centré 2 respectivement, sans correction à proximité de l'interface.

Les opérateurs d'interpolation Les différents opérateurs d'interpolation ont tous en commun de prendre en entrée un tableau de valeurs aux centres des cellules et de renvoyer un tableau de `Flux` de taille un de plus. Ils supposent tous des conditions aux bords périodiques et que la vitesse est positive de gauche à droite. Ils sont complètement indépendants du reste du code et sont accessibles à travers la méthode unique `face_val = interpolate(center_val, schema='type')`. Les opérateurs suivants sont implémentés :

- amont $f_{i+1/2} = f_i$,
- centré 2 : $f_{i+1/2} = \frac{f_i + f_{i+1}}{2}$,
- centré harmonique : $\frac{2}{f_{i+1/2}} = \frac{1}{f_i} + \frac{1}{f_{i+1}}$,
- QUICK de LEONARD [50],
- et WENO de LIU, OSHER et CHAN [52].

Surclassement de la classe StateProblem

Pour adapter l'équation résolue, le choix fait est de surclasser la classe abstraite `StateProblem` pour chaque nouvelle formulation. Cela présente l'avantage de pouvoir garder telles quelles chacune des formulations testées et d'en implémenter de nouvelles séparément sans risquer d'impacter le comportement des premières tant que le comportement de `StateProblem` n'est pas changé. Chacune d'entre elles réimplémente la méthode `compute_time_derivative`, qui permet de calculer la dérivée temporelle de la variable principale du schéma (souvent la température). Pour cela, elle calcule les flux nécessaires ainsi que les termes supplémentaires éventuels. En revanche cette méthode ne modifie pas l'état du `StateProblem`. Les formulations qui sont testées sont représentées dans le schéma Fig. 4.4 et peuvent

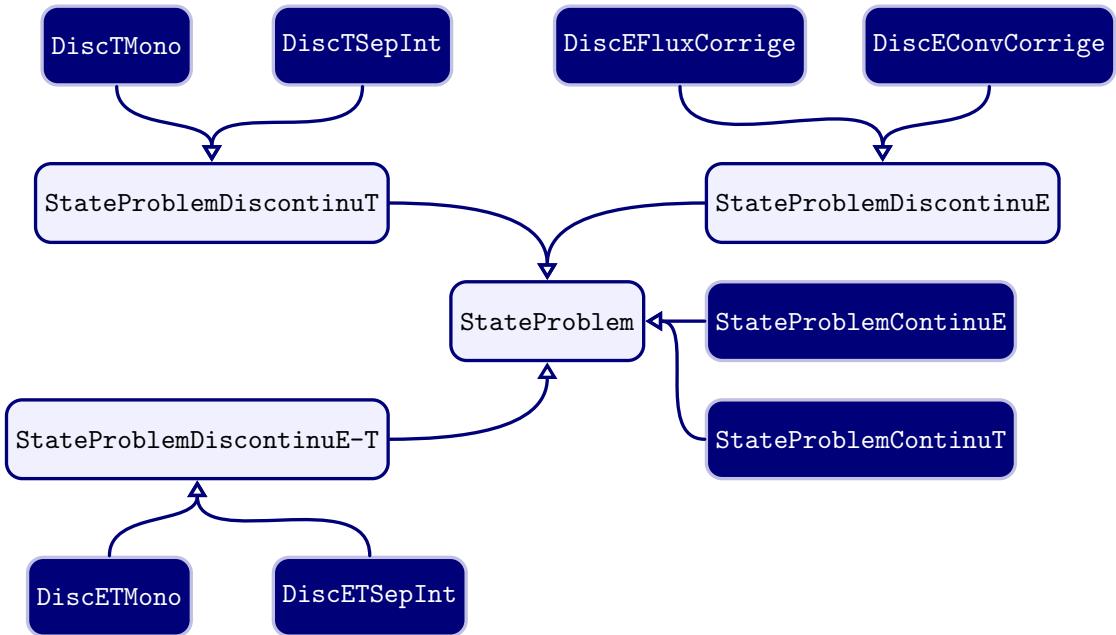


FIGURE 4.4 – Schéma simplifié des différentes formulations implémentées. En clair les classes abstraites et en foncé leurs dérivées concrètes.

être classées grossièrement dans 4 groupes, distincts des groupes correspondant au schéma d'héritage :

- les formulations en température (continues et discontinues), étudiées dans ce chapitre et en Chap. 5,
- les formulations en énergie présentées en Chap. 5 (continues et discontinues) et leurs variations (dégradées pour se rapprocher de la solution 3D cf. Chap. 6),
- les formulations en énergie utilisant des cellules ghost (comme la solution 3D finalement implémentée) étudiées Chap. 6,
- les formulations utilisant le couple de variables Température-Énergie et la résolution couplée des deux équations présentées en Annexe A.1.

4.1.5 Correction des flux à proximité de l'interface

Afin de corriger les problèmes de conservation liés à la présence d'interfaces, il est nécessaire de pouvoir calculer différemment les flux aux faces quand celles-ci sont proches d'une interface. Pour cela, une méthode particulière est appelée systématiquement après le calcul des flux dans l'approximation monofluide afin de les corriger localement si souhaité avant de les appliquer pour le calcul de la dérivée en temps de la température. Cette correction des flux monofluides est indépendante

des schémas appliqués précédemment pour les calculer. Elle est séparée en deux étapes, qui sont chacune exécutées dans une classe différente. Dans ces classes, un flux corrigé est calculé à proximité de l'interface. Ainsi pour tout groupe de cellules proches de l'interface, l'interpolation des température et flux thermiques aux positions des interfaces présentes dans l'objet **Bulles** est appelée. Elle est suivie d'une réinterpolation des flux aux faces quand le stencil d'interpolation inclut des cellules diphasiques (1 face en amont de l'interface et 2 en aval pour le stencil du QUICK). Ces deux méthodes sont indépendantes et cette architecture permet de tester de nombreuses combinaisons. Les tests sont présentés en Annexe B.

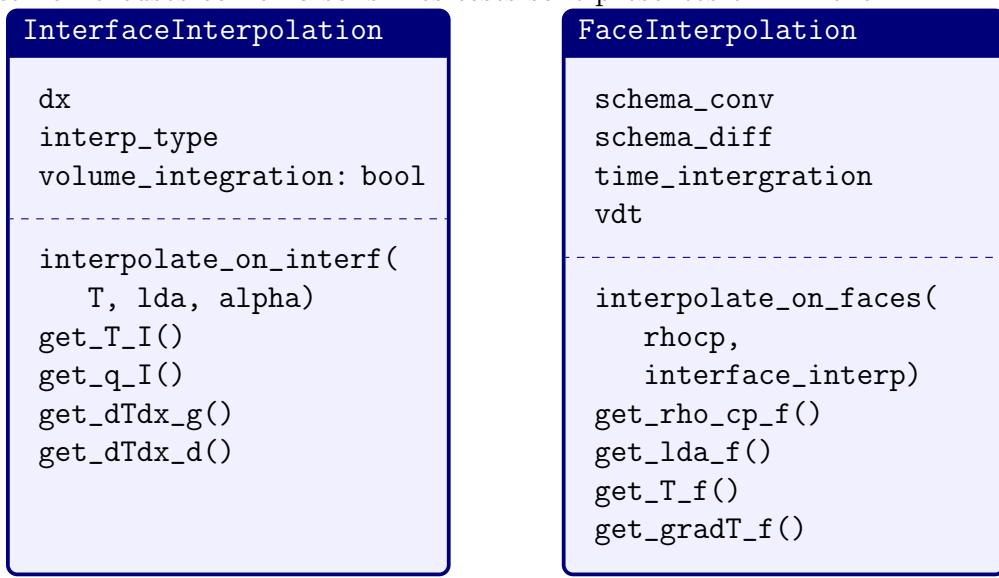


FIGURE 4.5 – Classes d'interpolation à l'interface de la température et des flux aux faces à proximité.

La classe InterfaceInterpolation

Dans cette classe l'interpolation des valeurs de température et flux à l'interface est réalisée. Cette classe est instanciée de manière unique, puis à chaque interface rencontrée elle calcule les températures, flux, dérivées spatiales de la température, etc à l'interface. Pour cela elle s'appuie sur les températures des cellules à proximité de l'interface (3 avant, la température de la cellule diphasique et 3 après) et la position de l'interface dans la cellule diphasique. Plusieurs méthodes de calcul sont implémentées dans des classes filles. La méthode principalement utilisée est la plus simple, l'interpolation d'ordre 1 à l'aide de l'équation de continuité des flux. Ainsi malgré la perte d'information que constitue l'abandon de la température monofluide de la maille diphasique, l'ajout d'une équation permet de garder un ordre 1. Les valeurs de température et de gradient à l'interface sont déterminés à l'aide de la relation de continuité du flux thermique normal : $\lambda_g \nabla T_g \cdot n_I =$

$\lambda_d \nabla T_d \cdot n_I$ et de la température : $T_I = T_g = T_d$. Les indices $_g$ et $_d$ désignent les valeurs respectivement à gauche et à droite de l'interface. Cette méthode peut être appliquée à différents ordres en réalisant un développement de Taylor à l'ordre n de la fonction de température à droite et à gauche. L'effet de l'ordre d'interpolation est étudié en Annexe B. Une interpolation du premier ordre est utilisée dans toutes les études présentées par la suite,

$$\lambda_g \frac{T_I - T_g}{d_g} = \lambda_d \frac{T_d - T_I}{d_d}. \quad (4.1)$$

Les notations sont présentées Fig. 4.6.

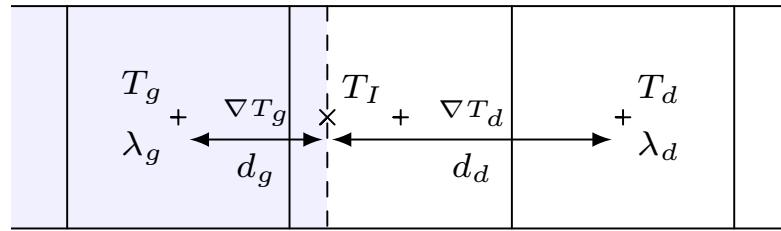


FIGURE 4.6 – Schéma de calcul de la température et des gradients à l'interface.

La classe FaceInterpolation

Cette classe est implémentée spécifiquement pour corriger les flux aux faces des cellules qui sont proches de l'interface. Elle calcule de manière interne toutes les interpolations qui mènent au calcul des flux convectifs ou diffusifs corrigés avec les valeurs à l'interface et sans utiliser la valeur de la température de la cellule diphasique (qui est incomplète et ne permet pas de retrouver la température et le gradient à l'interface). Cette classe mère est déclinée en de nombreuses classes filles selon les interpolations des flux convectifs et diffusifs choisies. L'une de ces méthodes est présentée Chap. 5 et les autres en Chap. 6. Elles diffèrent par l'ordre de l'interpolation choisie et son type et par la méthode de prise en compte de la variation temporelle de la surface mouillée des faces diphasiques (absente, par Cranck-Nicolson ou exacte dans le cas 1D).

4.1.6 La gestion temporelle d'une simulation

Les différents schémas temporels, sous-classes de TimeScheme

Différents schémas temporels sont implémentés. Ceux-ci font appels au `StateProblem` pour calculer la dérivée, puis l'appliquent différemment selon les variables primaires de l'équation et le schéma temporel choisi. Les `TimeScheme` suivants sont implémentés :

- `EulerTimeStep`
- `RK3TimeStep`
- `TemperatureEnergieEulerTimeStep`
- `TemperatureEnergieRK3TimeStep`
- `RK4TimeStep`

Il s'agit d'adaptations aux différentes variables du problème des schémas classique Euler explicite et RK3 explicite low-storage de WILLIAMSON [100]. Ces `TimeScheme` sont intimement associés à certains types de `StateProblem`, mais ils sont séparés pour traiter des cas variés de manière plus souple. Ainsi, un `EulerTimeScheme` peut traiter aussi bien un cas en température qu'un cas en énergie. En revanche, il ne peut pas traiter un cas où l'équation d'évolution fait intervenir différemment les termes de flux. La responsabilité de faire évoluer un `StateProblem` est entièrement déléguée au `TimeScheme`. Ainsi en plus de mettre à jour le champ de température, il est aussi responsable de la mise à jour de la position des marqueurs des bulles. Cette mise à jour provoque à son tour la mise à jour automatique du tableau d'indicatrice, sous la responsabilité de la classe `StateProblem`, qui doit être synchronisée à tout moment avec la position des bulles. Le `TimeScheme` couple l'évolution de la dynamique et de la thermique. Ainsi dans un schéma de type RK3 par exemple, dans chaque sous-pas de temps l'indicatrice est recalculée et les nouvelles propriétés thermiques correspondantes sont utilisées pour le calcul des flux thermiques.

La classe TimeProblem

L'orchestrateur La classe `TimeProblem` orchestre les différents éléments : elle fait évoluer en temps le `StateProblem` avec le `TimeScheme` associé, collecte les statistiques dans la classe `Statistics` et gère aussi l'affichage. Cette classe de très haut niveau ne fait appel qu'à des méthodes de haut niveau de ses attributs pour être le plus clair possible. Elle pourrait aussi bien être utilisée pour traiter des cas tris-dimensionnels.

Sauvegarde et reprise Initialement, chaque calcul était lancé dans un *Jupyter Notebook*, utilisé lors de la session, puis oubliée à la fin de la session. Les calculs étant légers (quelques minutes de temps de simulation au maximum), cela semblait

suffisant. Mais l'arrivée de classes modifiant le flux aux interfaces et la comparaison systématique de nouveaux calculs au calcul de référence sur un maillage fin, augmente le temps de calcul. De plus, le code étant en évolution constante, le risque de modifier la référence au cours du temps devenait de plus en plus grand. Il était alors peu pratique de devoir lancer à nouveau chaque simulation depuis le début pour retravailler sur les résultats et leur visualisation. Aussi, un système de sauvegarde reprise est développé avec une approche simple mais très complète implémentée par la méthode `load_or_compute`. Cette méthode de la classe `Problem` regarde dans le dossier de base de donnée si un calcul du même nom existe déjà. Elle liste tous les calculs enregistrés à différents instants, et charge celui qui est le plus près du temps de simulation visé. Ainsi, pour voir le calcul de la référence (diffusion pure sur une grille fine) au bout de deux secondes, si le calcul a déjà été lancé et enregistré au bout d'une seconde de simulation, la reprise se fait automatiquement à ce moment. La sauvegarde d'un calcul se fait à l'aide de la librairie native Python `pickle`. La reprise se fait selon le concept du patron de conception *prototype* qui permet de ne récupérer que les données de la simulation qui est rechargée, sans hériter de son ancien code avec `pickle`. Des tests sont menés pour vérifier que la simulation reprise correspond exactement à la simulation souhaitée (`PhysicalProperties`, `NumericalProperties` et `Bulles`). L'établissement d'une telle base de calcul est possible car il est assez léger de sauver un calcul grâce à leur faible empreinte mémoire (quelques Mo).

4.2 Validation du code

Afin de s'assurer de la pertinence des résultats qui sont présentés dans la suite, il convient de valider le code FluidDyn. La difficulté de cette validation est qu'il n'existe pas de solution analytique au problème général étudié. Qui plus est, il ne s'agit pas forcément de valider la pertinence physique du schéma en question dans une situation correspondant à un essaim de bulle avec convection et diffusion, étant donné que celui-ci n'est justement pas conservatif par exemple. Aussi la validation est faite en plusieurs étapes.

Dans une première partie, les opérateurs d'interpolation, représentant la partie du code la plus difficile à lire, sont validés indépendamment des objets qui les utilisent. Il s'agit de *tests unitaires*, une pratique courante en informatique pour vérifier l'absence de bogues évidents, ou le changement de comportement non désiré d'un code. Puis, les différents ordres de convergence des schémas temporels et d'interpolation spatiale sont validés.

Les méthodes plus haut-niveau du code sont validées le plus indépendamment les une des autres que possible, sur des cas simples. Ainsi, la sauvegarde et la reprise d'un cas complet est étudiée car elle représente un bon test par son appel

général à tous les attributs d'un calcul ; et un cas physique de diffusion pure, dont pouvons analyser les résultats, est réalisé.

4.2.1 Ordres d'interpolation et de convergences

Pour évaluer des ordres de convergence, l'erreur de la solution calculée par rapport à la solution de référence analytique est définie comme l'intégrale de la différence au carré entre le champ interpolé et la solution analytique sur tout le domaine. Ainsi, une norme L2 est évaluée :

$$\epsilon = \sqrt{\left(\sum_{k=0}^{n-1} (T_{\text{ref}_k} - T_{\text{calculée}_k})^2 \right) / n}. \quad (4.2)$$

L'ordre est défini comme la valeur de l'exposant b calculé en faisant la régression linéaire classique : $\log \epsilon = a + b \log \Delta x$.

L'ordre des opérateurs d'interpolation

La validation des opérateurs d'interpolation est traitée ici. Pour cela une mesure de leur ordre de convergence est réalisée. L'ordre de convergence des différents schéma est évalué dans deux cas. Le cas classique, avec comme fonction initiale un sinus de période 1 et le cas avec un créneau qui vaut :

$$T_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x_0 < x < x_1, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (4.3)$$

avec $x_0 = 0,3125$ m et $x_1 = 0,6042$ m. Dans ces deux cas, les conditions aux bords du domaine ($x = 0$ et $x = 1$) sont des conditions de périodicité.

La manière suivante de procéder est adoptée : une interpolation aux faces est réalisée à partir de la valeur de la solution initiale au centre de chaque cellule. Ensuite, cette interpolation est comparée à la valeur de la fonction analytique aux faces. Cette opération est effectuée pour chaque interpolateur pour différents maillages.

La Fig. 4.7 permet de constater que les schémas d'interpolation sont à peu près d'ordre 1 pour le upwind, 2 pour les autres et 3 pour le QUICK. Il est surprenant que le WENO ne soit que d'ordre 2, mais son ordre plus élevé apparaît en réalité non sur l'interpolation, mais sur l'opération totale de convection en volume finis (avec la différence des flux) comme cela est montré dans la section suivante.

En revanche, pour l'interpolation des valeurs aux faces dans la discréétisation d'un créneau, la Fig. 4.8 montre que tous les schémas sont d'ordre à peu près 1.

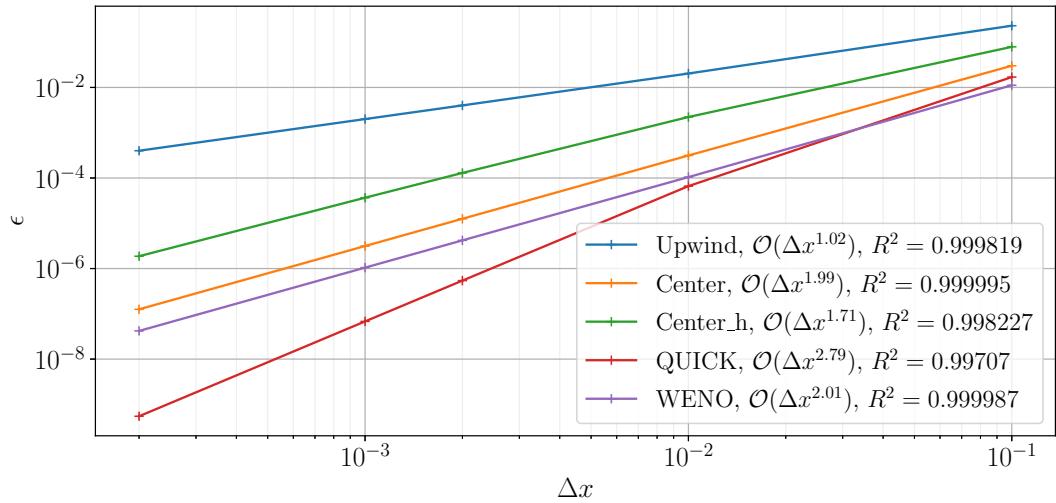


FIGURE 4.7 – Ordre de convergence des différents schémas d’interpolation pour le cas d’un sinus.

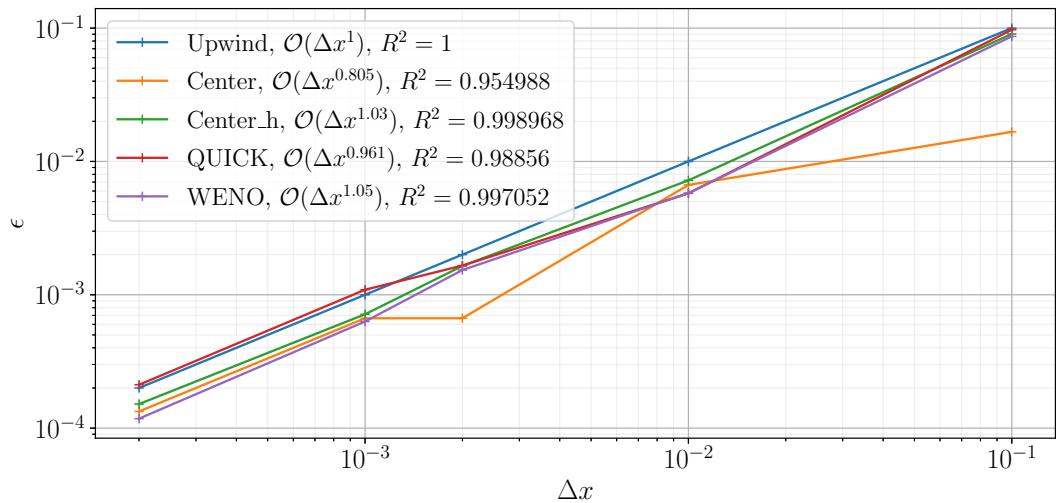


FIGURE 4.8 – Ordre de convergence des différents schémas d’interpolation pour le cas d’un créneau.

Cela est dû à la supposition de continuité et dérivabilité de la fonction interpolée nécessaire à l'établissement de schémas d'ordre élevés. Un schéma d'ordre supérieur spécifique au cas du créneau peut-être développé, mais ce cas ne nous intéresse pas exclusivement, le cas visé présentant une continuité de la température à l'interface.

L'ordre de convergence des opérateurs de convection

La configuration utilisée ici est celle de la convection pure d'un scalaire passif avec une vitesse constante. Le schéma en temps utilisé est un schéma Euler explicite. Ce schéma est choisi pour sa simplicité d'implémentation, minimisant le risque d'erreur. En effet, le but n'est pas de tester un `TimeProblem` complet, mais seulement les schémas spatiaux de manière isolée. Un pas de temps unique $\Delta t = 2 \times 10^{-6}$ s est choisi très petit devant le pas de temps limite donné par un nombre CFL de l'ordre de l'unité afin que les erreurs dues à l'intégration en temps soient négligeables devant les erreurs sur le calcul des flux convectifs. De plus, le temps de simulation est limité pour que ces erreurs accumulées au cours du temps soient encore petites devant les erreurs des schémas spatiaux. À nouveau, les tests sont faits pour la convection d'une fonction sinus, et la convection d'un créneau. Les conditions aux limites sont périodiques. Les simulations sont réalisées sur différents maillages, de plus en plus fin. La manière suivante de procéder est adoptée : l'interpolation aux faces pour le calcul du flux convectif est réalisée à partir des valeurs aux centres des cellules. Ces valeurs sont initialement calculées comme la valeur de l'intégrale de la solution initiale exacte sur chaque cellule. Dans ces conditions de convection pure avec une vitesse constante v , la solution de référence s'écrit

$$f(x, t) = f(x - vt, 0) = f_0(x - vt), \quad (4.4)$$

avec f_0 la fonction initiale de notre problème (le sinus ou le créneau).

Tous les paramètres physiques, la taille du domaine et la vitesse de convection sont pris égaux à l'unité. Le nombre de CFL est de 1×10^{-4} et la simulation est lancée sur un temps telle que la fonction soit convectée sur 3% de la longueur du domaine.

Fig. 4.9 les ordres attendus sont bien retrouvés, 1 pour le schéma amont, 3 pour le schéma QUICK et 5 pour le schéma WENO. L'ordre mesuré du schéma QUICK (2,26) peut sembler un peu faible, mais cela est dû à l'activation de son limiteur localisé à certains endroits, qui vient diminuer son ordre global. La Fig. 4.10 révèle qu'à proximité des variations de gradient les plus fortes (aux extrêmes du sinus) les erreurs des schémas QUICK et WENO sont beaucoup plus importantes qu'ailleurs. Cela est dû à leur comportement non linéaire, avec dégradation de l'ordre dans ces zones.

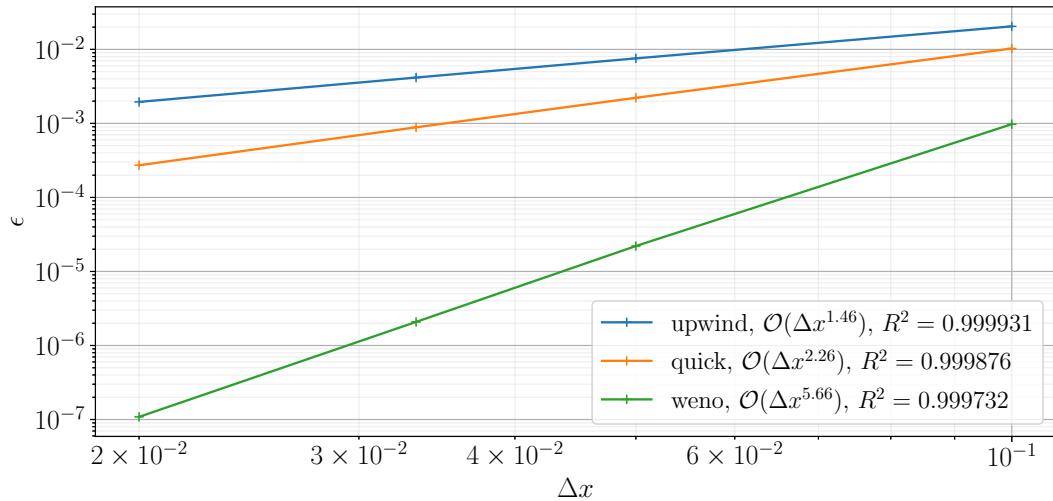


FIGURE 4.9 – Ordre de convergence pour la convection d'un sinus.

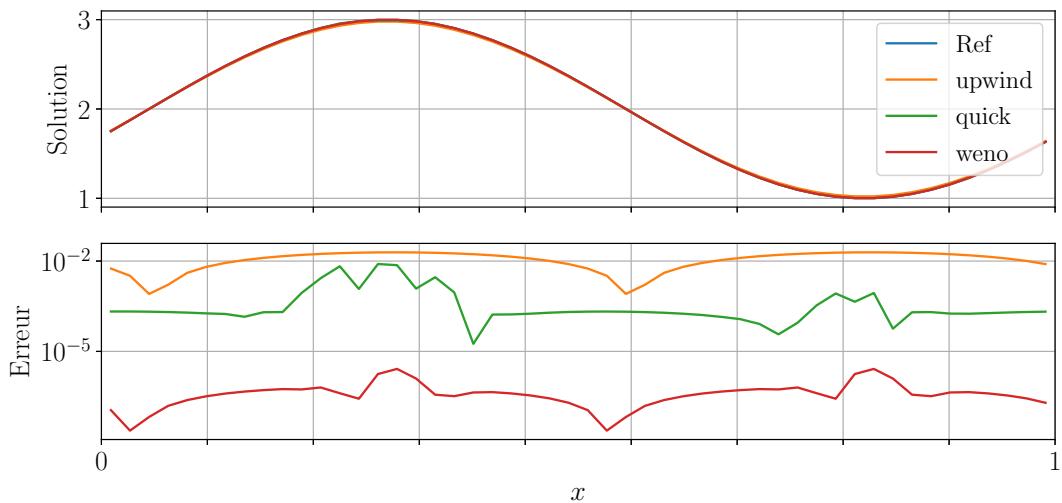


FIGURE 4.10 – Profils des solutions et erreurs obtenues pour la convection d'un sinus.

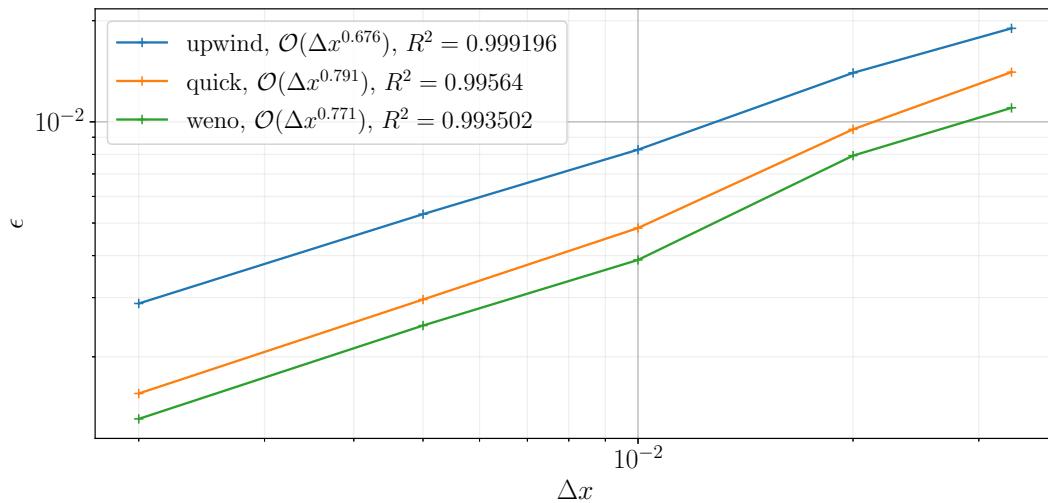


FIGURE 4.11 – Ordre de convergence pour la convection d'un créneau.

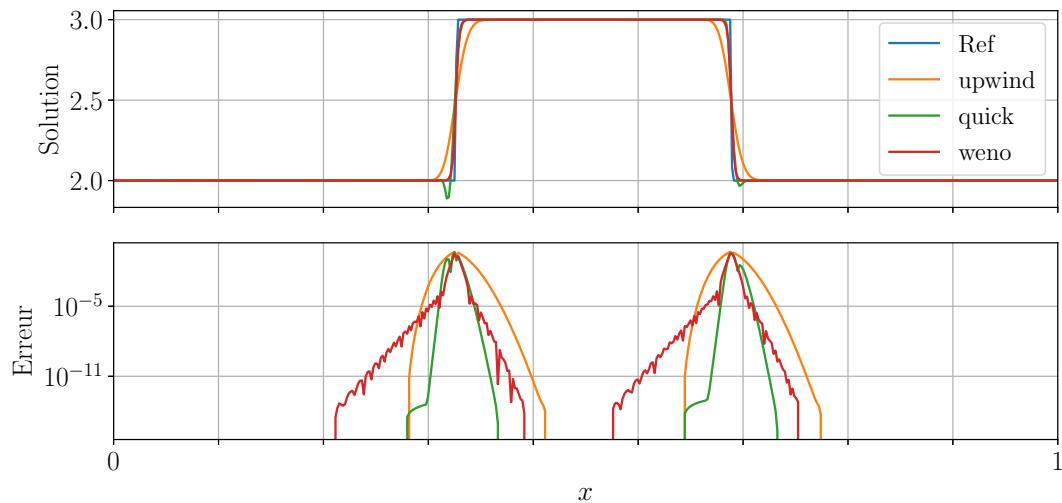


FIGURE 4.12 – Profils des solutions et erreurs obtenues pour la convection d'un créneau.

Pour la convection du créneau, la même dégradation d'ordre est observée que pour l'interpolation, pour les mêmes raisons. Ainsi pour les trois schémas l'ordre de convergence est inférieur à l'unité comme rapporté Fig. 4.11. Pour ce qui est du profil de la solution, il peut être constaté que le schéma QUICK est légèrement oscillant à proximité du front contrairement aux deux autres. Le profil de l'erreur rapporté Fig. 4.12 met en exergue le fait qu'à proximité de la discontinuité les trois schémas font une erreur similaire, mais qu'ils ne la limitent et ne la propagent pas de la même manière. Les schémas Upwind et QUICK sont purement amonts, ils ne propagent donc l'erreur que dans le sens de la vitesse. Les schémas QUICK et WENO diminuent beaucoup plus vite que le schéma Upwind la valeur de l'erreur qu'ils propagent. Ainsi l'erreur totale sur le WENO est plus faible que celle obtenue avec le QUICK, qui est elle-même plus faible que celle obtenue avec le schéma Upwind.

L'ordre de convergence des schémas spatiaux de diffusion

Pour tester le schéma de diffusion utilisé, un schéma classique centré linéaire d'ordre 2, une configuration identique à la précédente est utilisée, mais sans convection et avec de la diffusion cette fois-ci. Le schéma s'écrit

$$\nabla T|_{i+\frac{1}{2}} = \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x}. \quad (4.5)$$

Dans cette configuration, l'équation résolue est

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \nabla^2 T \quad (4.6)$$

et en partant d'une solution sinusoïdale, la solution au bout d'un temps t s'écrit

$$T(x, t) = \sin(2\pi x) \exp(-t/2\pi). \quad (4.7)$$

La Fig. 4.13 montre que l'erreur mesurée en norme 2 est bien quadratique de la taille de maille. La Fig. 4.14 met en lumière que contrairement aux schémas QUICK et WENO l'erreur par rapport à la solution est continue et ne varie pas brusquement, le schéma étant linéaire en les valeurs voisines pour le calcul des flux (sans limiteur ni coefficient non-linéaire).

L'ordre du schéma en temps

Pour la validation du schéma en temps, un `TimeProblem` complet est utilisé, mais en désactivant la convection et la diffusion. Une source est ajoutée pour avoir une solution en temps non triviale. En effet, il n'est pas possible d'observer l'ordre

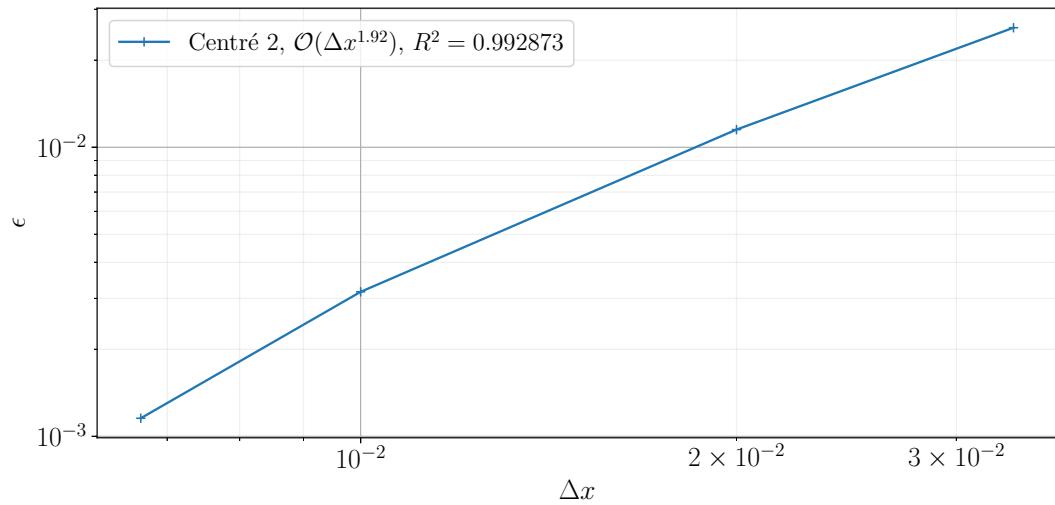


FIGURE 4.13 – Ordre de convergence de l’opérateur de gradient utilisé pour le calcul de la diffusion.

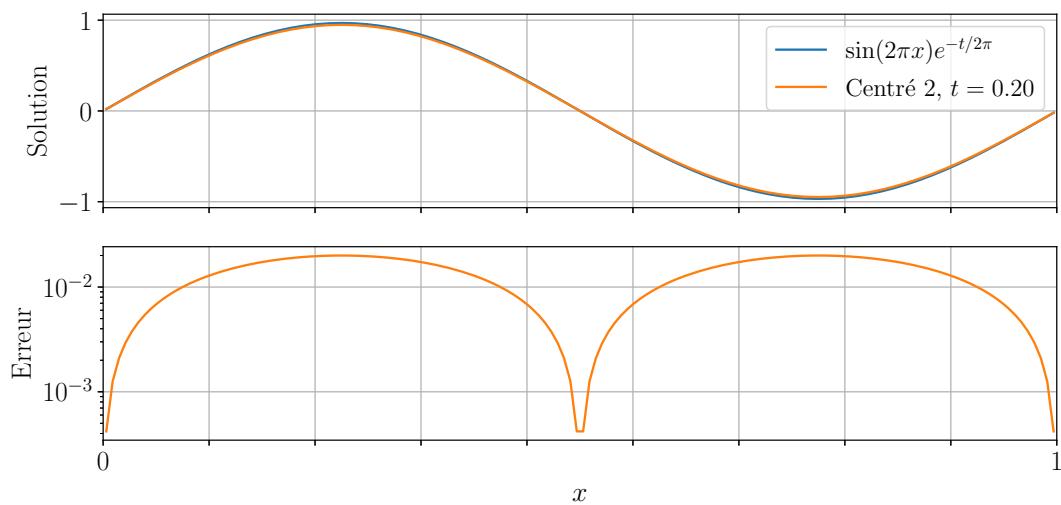


FIGURE 4.14 – Profil de température et de l’erreur obtenue dans une simulation de la diffusion d’un sinus.

en temps avec la convection ou la diffusion, dans la mesure où le pas de temps maximum est borné par les conditions de stabilité de CFL ou respectivement de Fourier. Mais pour des valeurs plus petites de pas de temps, l'erreur spatiale prédomine, empêchant la convergence globale de la solution vers la référence avec l'ordre du schéma en temps. C'est pour cette raison que la diffusion et la convection sont désactivées. La source utilisée est T . Ainsi l'équation à résoudre devient simplement

$$\frac{dT}{dt} = T, \quad (4.8)$$

une EDO du premier ordre dont la solution s'écrit $T(t) = T_0 \exp(t)$. En partant d'une solution spatiale initiale sinusoïdale, la solution de référence $T(x, t) = \sin(2\pi x) \exp(t)$ est obtenue. La solution explose donc au cours du temps. Le temps de simulation est choisi arbitrairement à $t = 5,00$ s pour avoir des résultats qui montrent une erreur visible pour le cas d'Euler, mais pas trop grande pour rester dans le bon régime de convergence.

Les ordres des schémas Euler et RK3 implémentés sont bien respectivement estimés d'ordre 1 et 3 Fig. 4.15. Sur la Fig. 4.16 les profils d'erreurs sont similaires, mais le Runge-Kutta donne des erreurs bien plus faibles. Sur ce graphique il est indistinct à l'œil de la solution analytique.

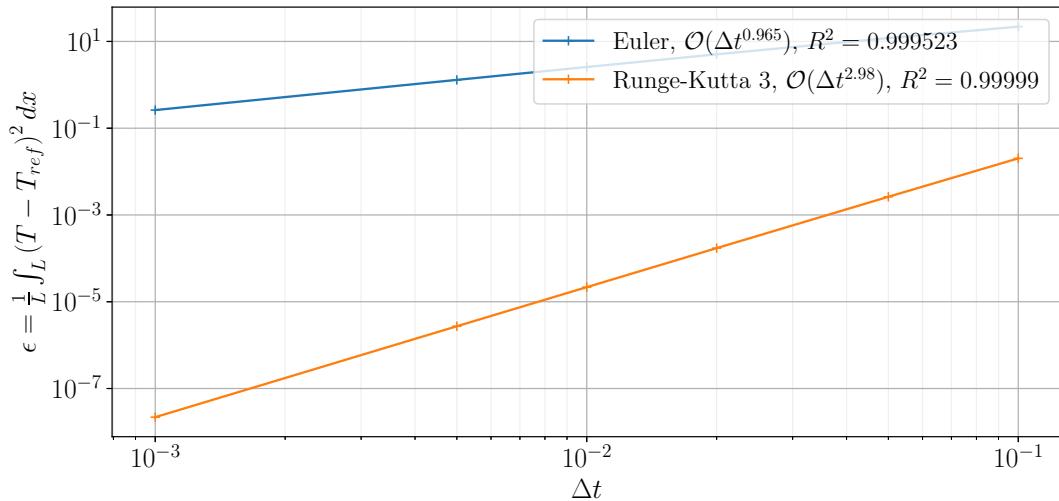


FIGURE 4.15 – Ordre de convergence des schémas en temps sans convection ni diffusion, avec un terme source.

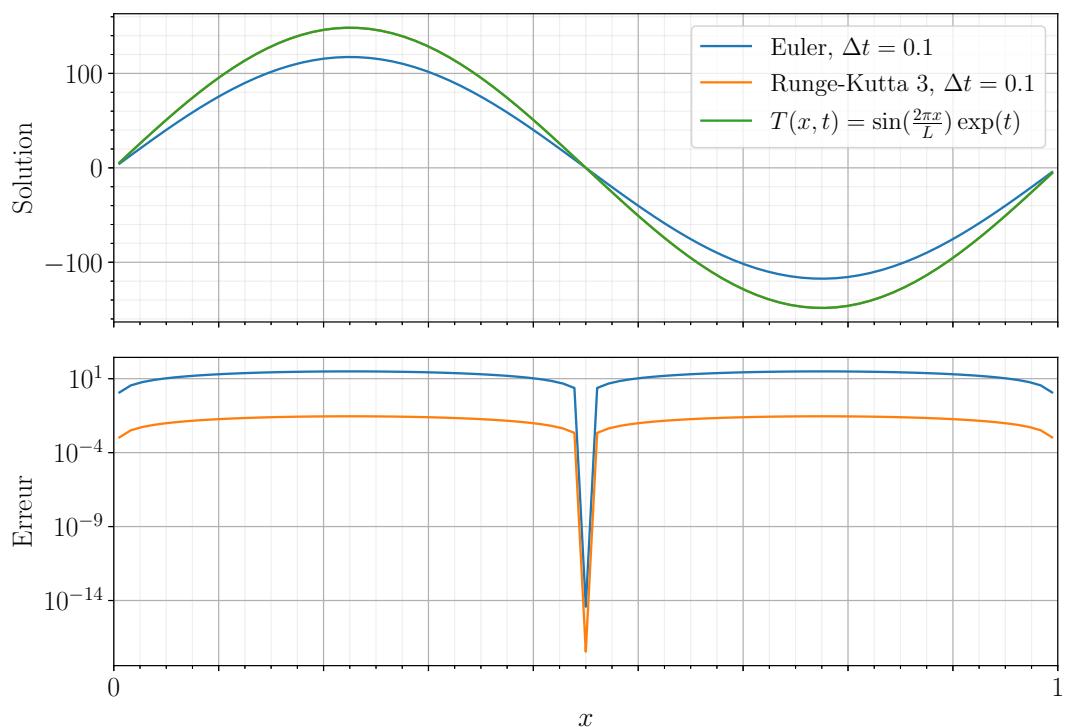


FIGURE 4.16 – Profil de la solution et erreur de la résolution d'un cas avec terme source.

4.2.2 Le cas sans saut de propriété : pseudo-monophasique

Instanciation d'un cas, sauvegarde et reprise

Dans ce cas test, un cas complet est utilisé. Un crêneau de température est convecté et diffusé au cours du temps. Il ne présente cependant pas de réelles discontinuités étant donné que la diffusion régularise le crêneau et que les paramètres physiques sont tous égaux à l'unité. Le taux de vide, qui correspond à la largeur du crêneau sur la largeur du domaine est de 6%. Dans ce cadre-là, une première simulation est lancée sur un temps $t_0 = 0,02$ s. Cette simulation est ensuite sauvegardée. Une autre instance de simulation est créée avec les mêmes paramètres physiques que la précédente, puis elle reprend la première en lisant les fichiers de sauvegarde (`StateProblem` et `Statistics` sont donc repris). Puis la simulation est à nouveau avancée jusqu'à $t = 0,04$ s. D'autre part, une simulation identique aux deux autres est instanciée puis lancée d'une traite sur $t = 0,04$ s.

Les deux profils de températures obtenus sont comparés Fig. 4.17 et la différence entre les deux est bien identiquement nulle. Il peut en être déduit que toutes les variables nécessaires au calcul sont reprises avec succès.

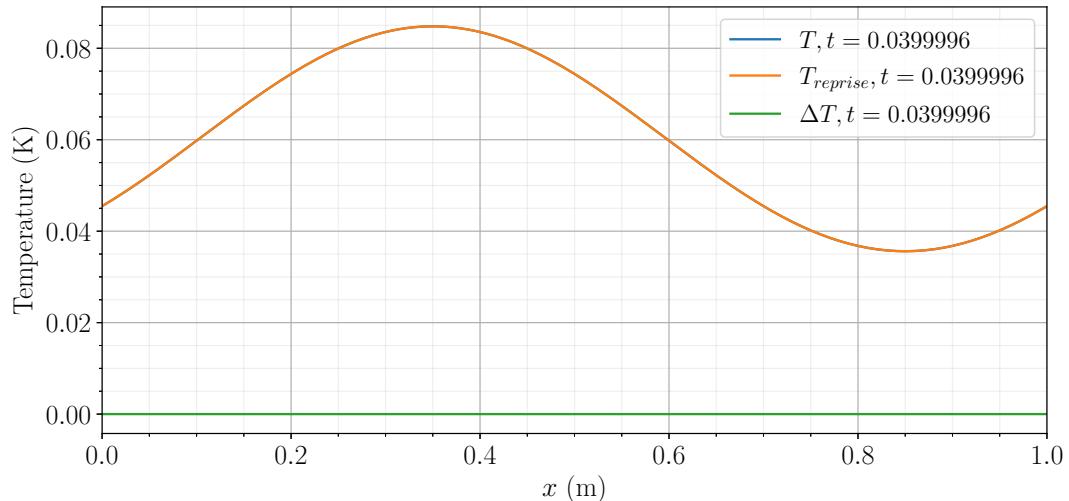


FIGURE 4.17 – Solution en température pour le cas sans sauvegarde ni reprise et pour le cas repris après une sauvegarde à mi-temps.

Analyse des résultats dans un cas plus réaliste

Définition du cas Dans ce cas-ci, les résultats obtenus pour les différents schémas en espace sont comparés pour un cas complet pseudo-monophasique, c'est-à-

dire sans saut de propriété, en partant d'un créneau de température. Ces simulations sont réalisées avec les paramètres reportés Tab. 4.1 et Tab. 4.2. Ce genre de

TABLEAU 4.1 – Paramètres physiques utilisés dans les simulations monophasiques

ρc_p	$\text{J K}^{-1} \text{m}^{-3}$	$7,03 \times 10^4$
λ	$\text{W K}^{-1} \text{m}^{-1}$	$5,50 \times 10^{-2}$
L	m	0,02
α	—	6%
n_{bulle}	—	1
v	m s^{-1}	0,20

TABLEAU 4.2 – Paramètres numériques utilisés dans ces simulations monophasiques

$D_b/\Delta x$	—	30
Δx	m	$3,91 \times 10^{-5}$
CFL_{\max}	—	0,50
Fo_{\max}	—	0,50
Δt (lim. par CFL)	s	$9,77 \times 10^{-5}$
Schéma temporel		RK3
Schéma diffusion		Centré 2

simulation unidimensionnelle permet d'obtenir par exemple un nombre de Nusselt. Celui-ci est défini de la manière suivante,

$$Nu = \frac{\rho_l c_{pl} \frac{dT_l}{dt} 3D_b}{\lambda_l \Delta T}, \quad (4.9)$$

avec $\Delta T = |T_l - T_v|$, $T_k = \frac{\alpha_k}{L} \int_L T_k(x, t) dx$ et $\alpha_k = \frac{1}{L} \int_L I_k(x) dx$, où I_k est l'indicateur de présence de la phase k .

Obtention d'une solution semi-analytique La mise en place d'une solution semi-analytique permet de valider plus rigoureusement les résultats obtenus avec les différents opérateurs et l'instanciation d'un `TimeProblem` qu'en utilisant un cas sans convection mieux résolu. Dans ce cas particulier, l'équation à résoudre s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (4.10)$$

Une solution de cette équation peut être obtenue grâce à la décomposition en série de Fourier de la solution initiale. En effet, en supposant qu'une solution peut être trouvée sous la forme particulière de la décomposition de variable, des solutions de cette forme sont obtenues,

$$T_n(x, t) = e^{-t \frac{\lambda}{\rho C_p} \omega_n^2} (A_n \cos(\omega_n x) + B_n \sin(\omega_n x)). \quad (4.11)$$

Donc en prenant $\omega_n = \frac{2\pi n}{L}$, les coefficients A_n et B_n sont déterminés par la décomposition en série de Fourier,

$$T(x, 0) = A_0 + \left(\sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos(\omega_n x) + B_n \sin(\omega_n x) \right), \quad (4.12)$$

qui donne,

$$\text{pour } n = 0, \quad A_0 = \frac{1}{L} \int_0^L T_0(x) dx, \quad (4.13)$$

$$\forall n > 0, \quad A_n = \frac{2}{L} \int_0^L T_0(x) \cos(\omega_n x) dx \quad (4.14)$$

$$\forall n > 0, \quad B_n = \frac{2}{L} \int_0^L T_0(x) \sin(\omega_n x) dx, \quad (4.15)$$

faciles à calculer car T_0 est une fonction créneau. La solution de ce problème s'écrit donc,

$$T(x, t) = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} T_n(x, t). \quad (4.16)$$

Le nombre de Nusselt sur un créneau de température 1D défini en Éq. (4.9) est donc calculé numériquement à partir de cette solution. Ce calcul fait appel à trois paramètres numériques, le nombre de points utilisés pour le calcul de la dérivée de T_l , noté n_t , le nombre de points sur le domaine spatial $[0, L]$ utilisés pour le calcul de l'intégrale de $T_l(t) = \int_0^L I_l(x, t) T(x, t) dx / \int_0^L I_l(x, t) dx$, noté n_k , et le nombre de modes de Fourier n_n . Trois études en convergence sont réalisées pour obtenir la solution de référence la plus fiable. Dans chaque cas, l'un de ces paramètres change et les deux autres sont fixés aux valeurs qui seront considérées comme convergées. La Fig. 4.18 montre que $nt = 100$ est suffisant, dans ce cas. La Fig. 4.19 montre que $n_k = 150$ donne une convergence satisfaisante. Et la Fig. 4.20 montre que 100 modes permettent d'obtenir une bonne solution. Ce sont donc les paramètres retenus dans la suite.

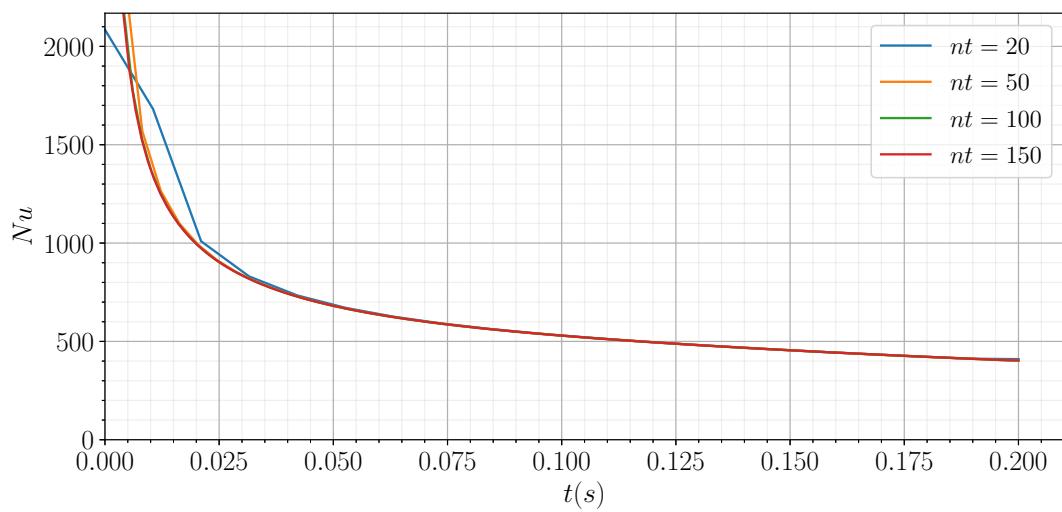


FIGURE 4.18 – Convergence du nombre de Nusselt calculé à partir de la solution en série de Fourier pour différents n_t

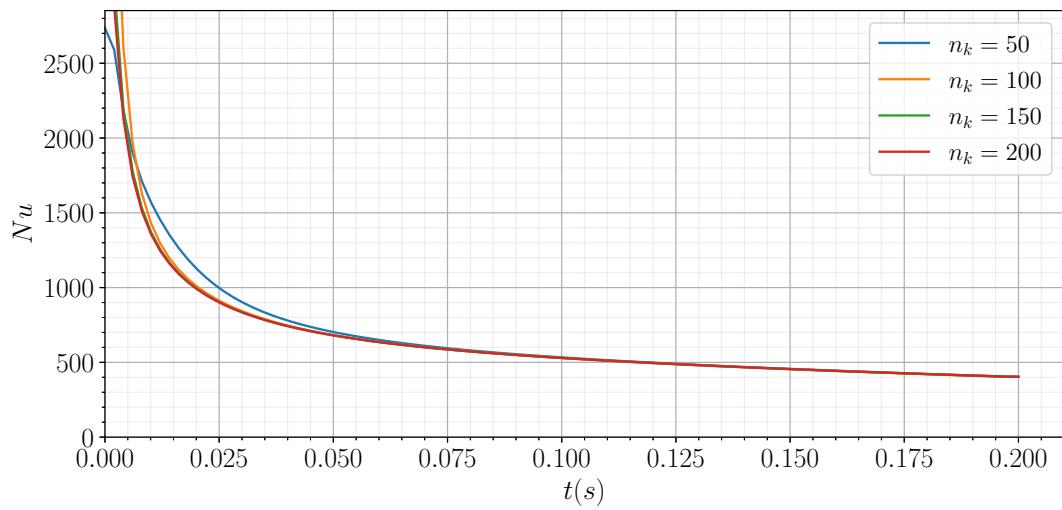


FIGURE 4.19 – Convergence du nombre de Nusselt calculé à partir de la solution en série de Fourier pour différents n_k

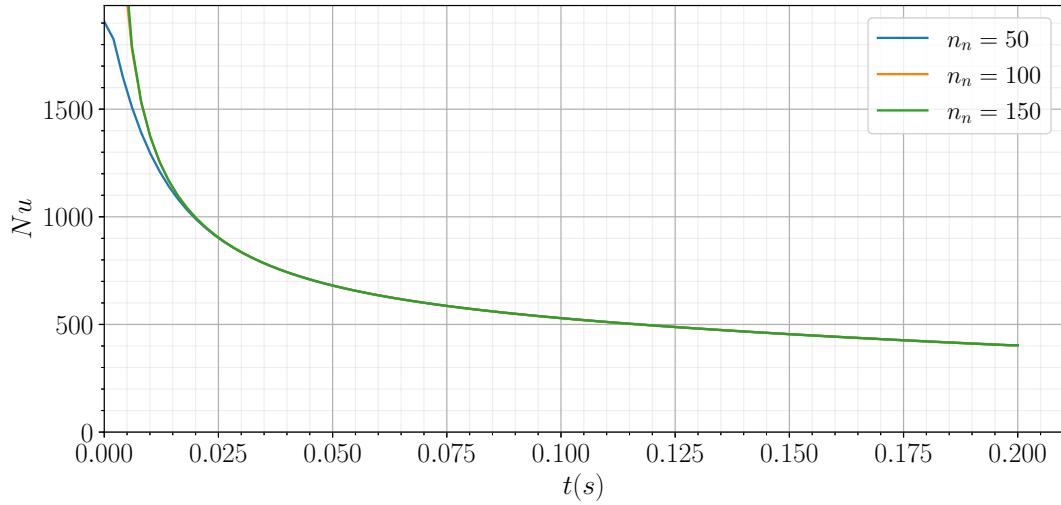


FIGURE 4.20 – Convergence du nombre de Nusselt calculé à partir de la solution en série de Fourier pour différents n_n

Résultats numériques La simulation est lancée sur 2 parcours complets du domaine. Le profil reporté Fig. 4.21 est obtenu. Les schémas WENO et QUICK donnent des profils de température relativement proches de la référence pour ce raffinement de maillage (30 mailles par diamètre de bulle, contre 60 pour la référence, qui n'est pas convectée). Cela s'observe aussi sur l'évolution temporelle de la température par phase. Cette température est calculée à tout pas de temps comme étant

$$T_k(t) = \frac{\int_L T(x, t) I_k(x, t) dx}{\int_L I_k(x, t)}. \quad (4.17)$$

Elle est tracée Fig. 4.22. Là aussi que les résultats obtenus pour les schémas QUICK et WENO sont peu discernables et très proches de la référence, contrairement aux résultats obtenus avec le schéma Upwind qui est très diffusif. Toutes ces simulations sont conservatives, ce qui était attendu puisque les schémas utilisés sont de type volumes finis dans une équation aux propriétés constantes. La Fig. 4.23 permet de constater que le nombre de Nusselt tend vers une constante au fur et à mesure que la solution à proximité de la bulle commence à “oublier” la forme initiale du crêneau de température. Elle confirme aussi le fait que le schéma Upwind est très loin d'être convergé contrairement aux deux autres, qui sont proches de la solution de référence sans convection et de la solution de référence semi-analytique calculée à partir de la série de Fourier décrite précédemment. En plus de montrer la convergence du nombre de Nusselt vers une valeur constante, ce test est beaucoup plus restrictif sur la convergence de la solution que la simple observation de

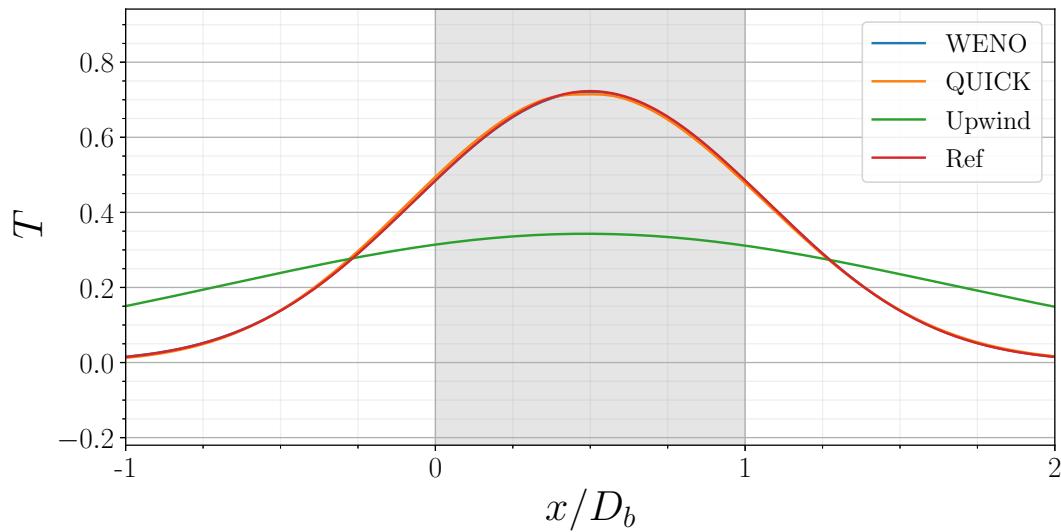


FIGURE 4.21 – Profils de température obtenus dans une simulation complète, sans saut de propriété entre les deux phase.

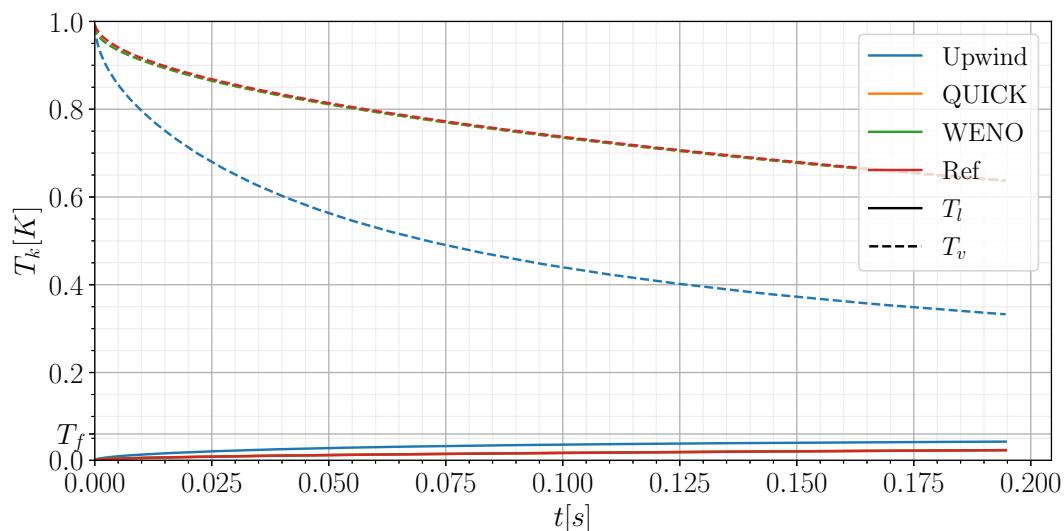


FIGURE 4.22 – Évolution de la température de chaque phase au cours du temps dans une simulation sans saut de propriété.

l'évolution des températures par phase, étant donné que le nombre de Nusselt fait intervenir une dérivée en temps de la température par phase, moins bien résolue a priori.

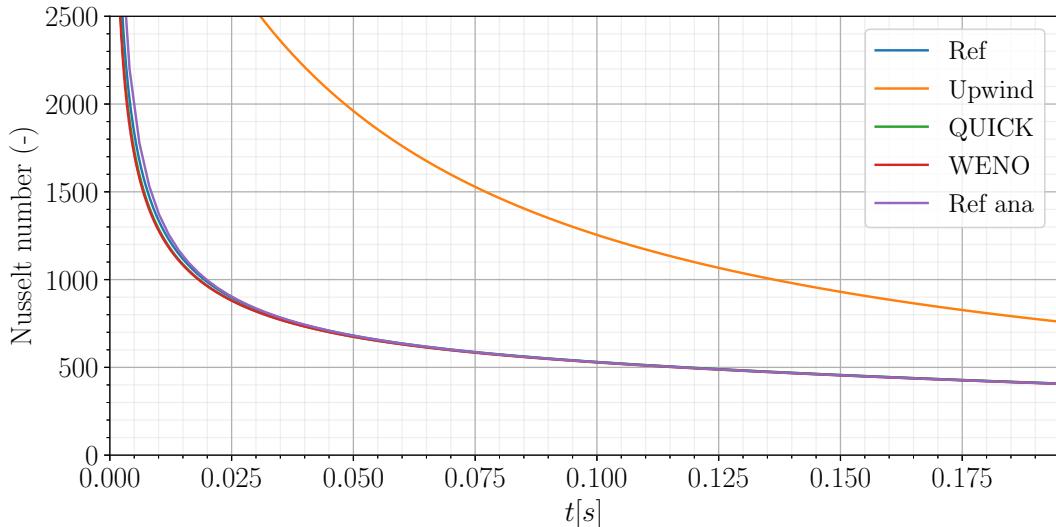


FIGURE 4.23 – Nombre de Nusselt mesuré dans une simulation sans saut de propriété.

4.3 Études préliminaires sur le schéma température monofluide avec propriétés discontinues

Dans cette section les différentes études réalisées mais non présentées Chap. 5 sont détaillées. Elles apportent un éclairage sur les choix qui ne sont pas démontrés Chap. 5 mais qui sont tout de même utilisés dans l'orientation des recherches. Une configuration similaire à celle utilisée pour les études 3D réalisées avec TrioCFD-IJK sans saut de propriétés thermiques entre les phases est mise en place. Les paramètres sont présentés Tab. 4.3. Les simulations sont toutes réalisées avec un schéma RK3 en temps et un schéma QUICK pour la convection. La diffusion utilise un schéma centré 2, comme renseigné Tab. 4.4. La température initiale est prise égale à 1 dans les bulles et 0 en dehors. À l'interface la température est calculée de sorte que quelle que soit la position de l'interface initiale, l'énergie dans le domaine soit identique. Elle est donc prise comme une moyenne de l'énergie dans la cellule

divisée par la moyenne de la capacité thermique massique,

$$T = \begin{cases} 0 & \text{si } I_l = 1, \\ 1 & \text{si } I_l = 0, \\ \frac{\rho c_{p_v} I_v}{\rho c_{p_v} I_v + \rho c_{p_l} I_l} & \text{si } 0 < I_l < 1. \end{cases} \quad (4.18)$$

Le schéma utilisé est construit à partir de l'équation continue monofluide de tem-

TABLEAU 4.3 – Paramètres physiques utilisés par défaut dans chaque simulation

		Liquide	Vapeur
ρc_p	J K ⁻¹ m ⁻³	$7,03 \times 10^4$	$7,03 \times 10^5$
λ	W K ⁻¹ m ⁻¹	$5,50 \times 10^{-2}$	$1,55 \times 10^1$
L	m	0,02	
α	—	0,06	
n_{bulle}	—	1	
v	m s ⁻¹	0,20	

TABLEAU 4.4 – Paramètres numériques utilisés par défaut dans chaque simulation

$D_b/\Delta x$	—	30
Δx	m	$3,91 \times 10^{-5}$
CFL _{max}	—	0,50
Fo _{max}	—	0,50
Δt (lim. par Fo)	s	$5,56 \times 10^{-6}$
Schéma temporel	RK3	
Schéma convection	QUICK	
Schéma diffusion	Centré 2	

pérature dans le domaine. Il est discréteisé en intégrant sur les volumes élémentaires de la manière suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{V_{cell}} \int_{V_{cell}} T dV \right) = - \oint_{S_{cell}} T \underline{v} \cdot \underline{n} dS - \left(\frac{\alpha_l}{\rho c_{pl}} + \frac{\alpha_v}{\rho c_{p_v}} \right) \oint_{S_{cell}} \underline{q} \cdot \underline{n} dS. \quad (4.19)$$

Dans cette formulation, présentée en Sec. 1.5.1, les températures sont connues au centre des mailles, et les gradients aux faces.

TABLEAU 4.5 – Paramètres numériques utilisés pour la référence (sans convection)

$D_b/\Delta x$	—	59
Δx	m	$2,00 \times 10^{-5}$
CFL _{max}	—	-
Fo _{max}	—	0,50
Δt (lim. par Fo)	s	$9,10 \times 10^{-8}$
Schéma temporel		RK3
Schéma convection		-
Schéma diffusion		Centré 2

4.3.1 Étude de convergence numérique de la perte d'énergie

Ici seule la convergence en temps est regardée. La convergence spatiale est étudiée en Sec. 5.2.2. La simulation est lancée sur 0,10 s avec une taille de maille $\Delta x = 7,00 \times 10^{-5}$ m. La Fig. 4.24 montre pour les profils de température ne se rapprochent pas de la référence quand le pas de temps est plus petit. L'étude de la convergence en pas de temps mène donc à la conclusion qu'un pas de temps plus petit ne réduit pas la perte d'énergie. Lorsque l'on augmente le nombre de pas au cours d'une simulation, la perte d'énergie globale cumulée tend à être plus importante. La relation observée sur la Fig. 4.25 est décroissante en fonction de la valeur du pas de temps, conduisant à une perte énergétique limite pour un pas de temps infiniment petit qui peut être estimée à 7903 J/m³ pour ce maillage.

4.3.2 Études de l'influence respective des erreurs de convection et de diffusion sur la perte d'énergie

L'étude est réalisée avec les paramètres physiques reportés Tab. 4.3 à l'exception de la vitesse qui varie selon les valeurs reportées Tab. 4.6, et les paramètres numériques reportés Tab. 4.4. Le temps de simulation utilisé est d'une seconde. L'objectif de cette étude est de comprendre l'origine de la perte d'énergie observée dans un essaim de bulles 3D présenté Sec. 5.2.1. Afin de ne pas modifier le comportement de la diffusion, le seul paramètre qui est ajusté pour comprendre le rapport d'influence sur la perte d'énergie de la convection et de la diffusion est la vitesse constante de convection des bulles ici.

La Fig. 4.26 montre des profils de température superposés pour comparer les solutions après une seconde de convection et de diffusion du créneau initial de température. La bulle est représentée par la partie grisée et l'échelle en x est adimensionnée par rapport à celle-ci. Les profils de température des simulations à plus grande vitesse ont une température plus faible dans la phase vapeur. Il ne

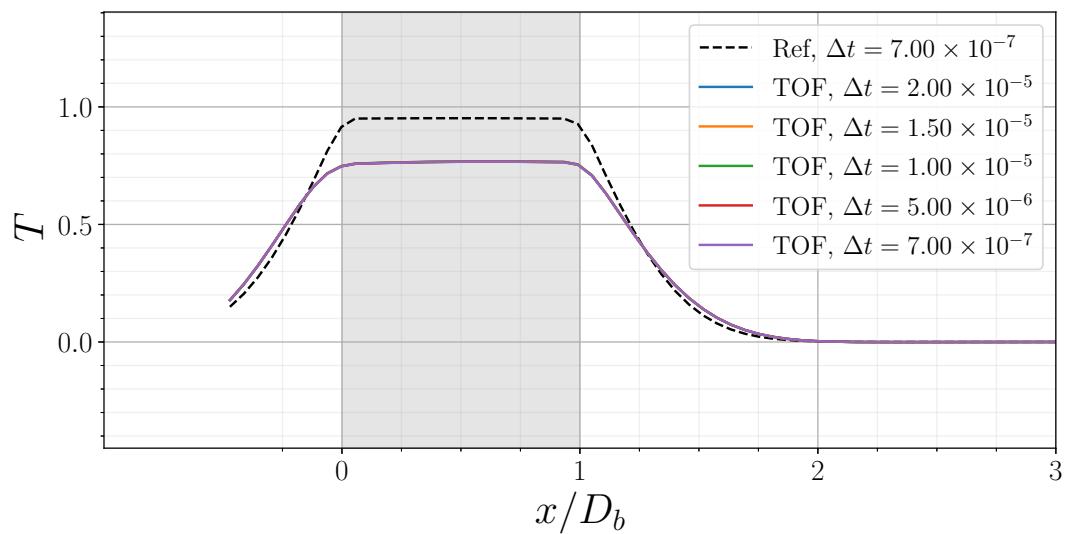


FIGURE 4.24 – Étude de sensibilité de la perte d'énergie en fonction du pas de temps. Profil d'un échelon de température convecté et diffusé.

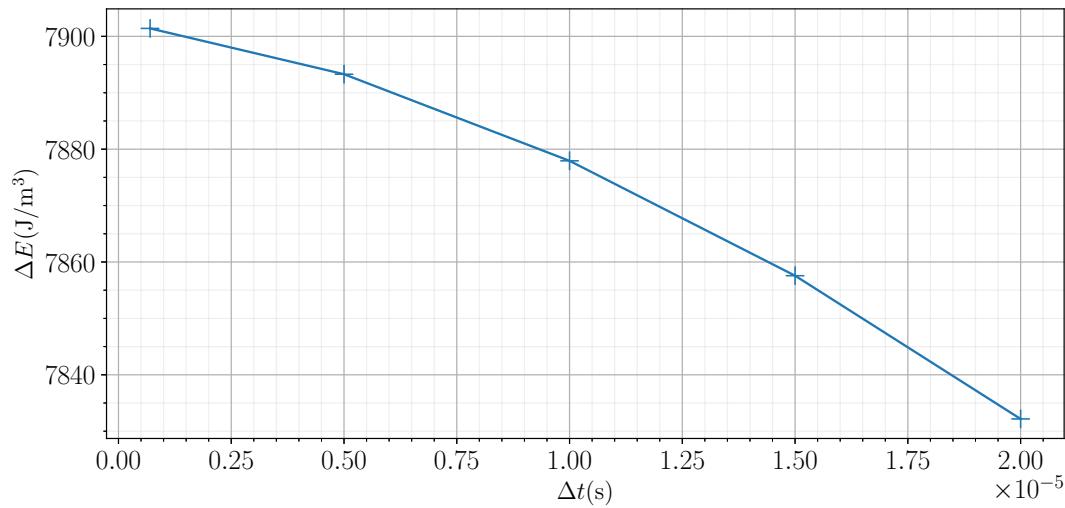


FIGURE 4.25 – Convergence en temps, perte d'énergie en fonction du pas de temps.

TABLEAU 4.6 – Vitesses utilisées pour l'étude de l'influence de la convection sur la perte d'énergie

v m/s
0,00
0,01
0,02
0,05
0,20
0,30
0,50

semble toutefois pas s'agir d'une simple diffusion numérique de la température. En effet, une simple diffusion numérique aurait mené à une température plus élevée dans le liquide pour des simulations ayant une température plus faible dans la vapeur. Il s'agit donc d'une perte d'énergie thermique, et celle-ci semble d'autant plus importante que la vitesse de convection est élevée (à même diffusion).

L'évolution de l'énergie en fonction du temps tracée sur la Fig. 4.27 permet bien de constater que l'énergie thermique est perdue au cours du temps dans toutes les simulations — à l'exception de celle où il n'y a pas de convection qui présente une perte négligeable devant le reste — et que la vitesse augmente cette perte d'énergie thermique de manière systématique.

L'évolution de cette perte d'énergie en fonction de la vitesse est présentée sur la Fig. 4.28. La perte d'énergie augmente très vite pour des petites vitesses, puis semble croître lentement pour des vitesses plus importantes. À la vitesse correspondant à notre simulation d'essaim en trois dimensions (avec une vitesse relative $u_r = 0,20 \text{ m/s}$), la perte est aux alentours de 34%. Pour réduire la perte à 10% il faudrait diviser cette vitesse par un facteur 10, cela correspondrait à un nombre de Reynolds de bulle très faible ne faisant pas apparaître de phénomènes turbulents.

Il est intéressant de remarquer qu'en traçant sur la Fig. 4.29 l'énergie dans la simulation en fonction de la distance parcourue par la bulle, les courbes semblent correspondre. Ainsi le facteur de similarité serait la distance parcourue par la bulle. Cela signifie que même en étudiant des phénomènes à faible vitesse, si la simulation vise à observer la bulle parcourir une grande distance, la perte d'énergie thermique est tout de même importante.

Plusieurs conclusions peuvent en être tirées. Tout d'abord, la convection de la température est prépondérante sur la perte d'énergie. Ensuite, la solution de la simulation sans convection présente une perte d'énergie complètement négligeable

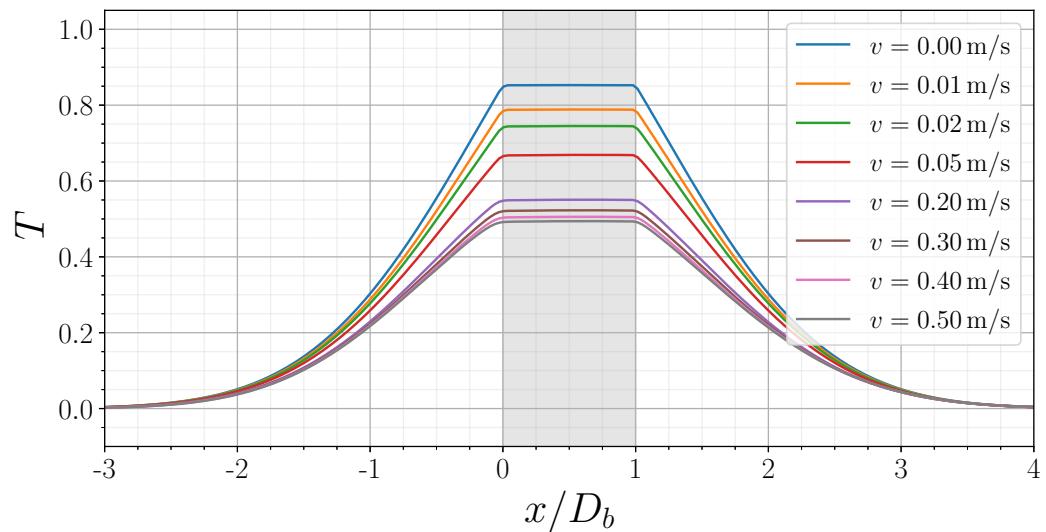


FIGURE 4.26 – Profil de température selon la vitesse au bout de 1s.

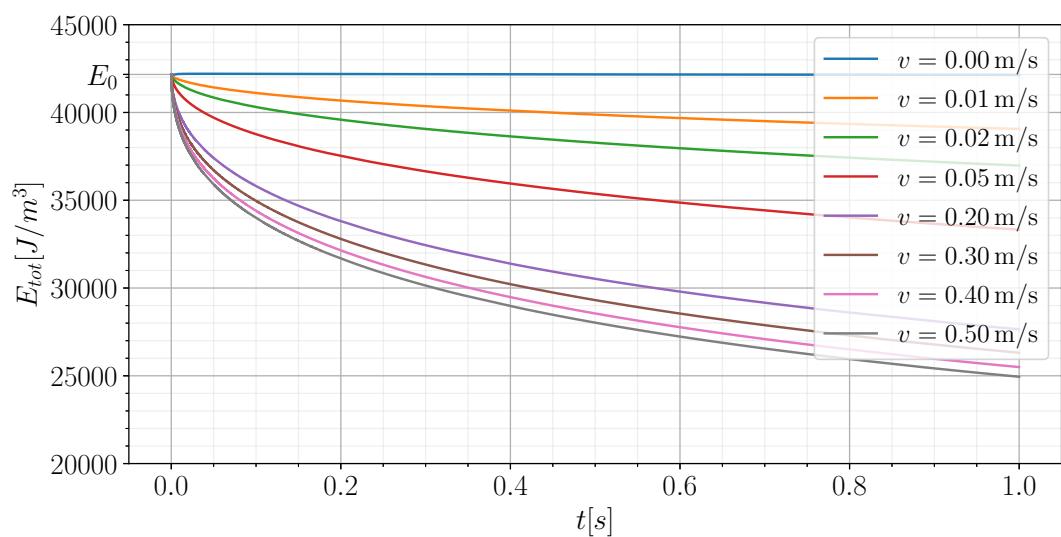


FIGURE 4.27 – Évolution de l'énergie dans le volume selon la vitesse.

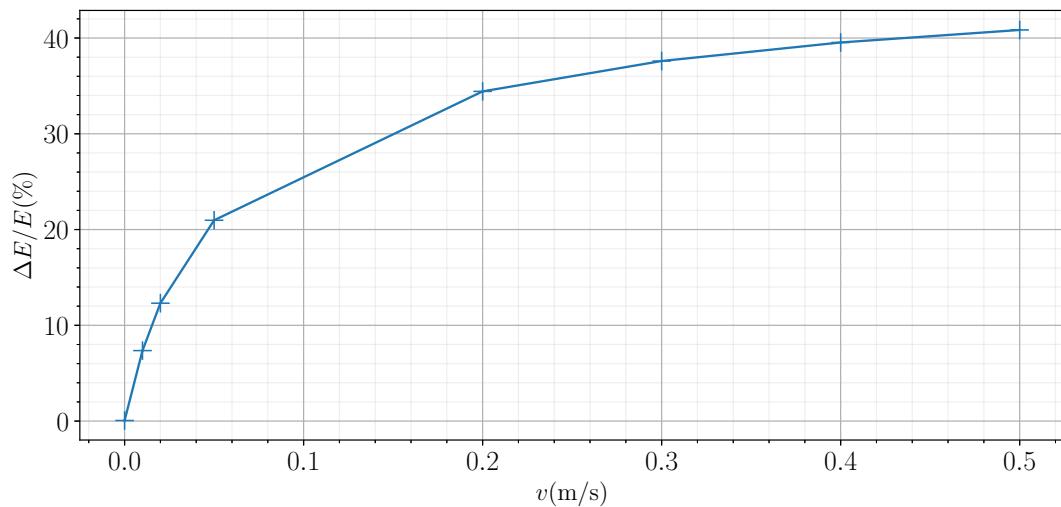


FIGURE 4.28 – Perte d'énergie en fonction de la vitesse constante de convection.

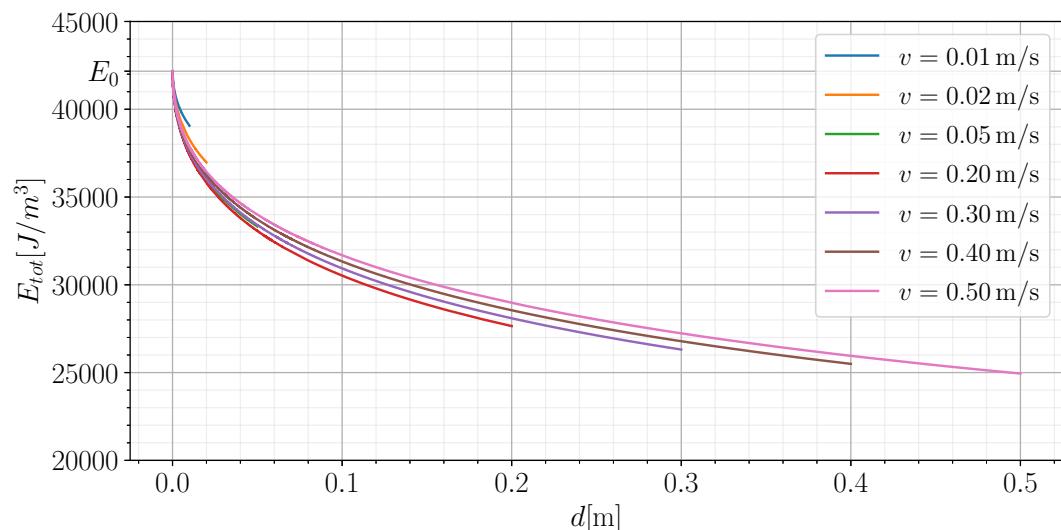


FIGURE 4.29 – Évolution de l'énergie en fonction de la distance parcourue par la bulle.

par rapport aux autres simulations et elle présente un profil de température qui reste symétrique, ce qui était attendu car l'opérateur de diffusion est symétrique. Des simulations sans convection sont donc utilisées sur des maillages plus fins en tant que référence dans la suite. Enfin, la correction de ces pertes d'énergie est inévitable pour mener à bien une simulation satisfaisante avec de tels sauts de propriété.

4.3.3 Étude de l'influence des paramètres physiques sur la perte d'énergie

Afin de caractériser le problème de perte d'énergie, une étude est faite sur les paramètres physiques de la simulation. Pour cela, les nombres adimensionnés suivants sont définis :

- λ_l/λ_v le rapport des conductivités thermiques, qui pilote le rapport des pentes à l'interface,
- $\rho c_{pl}/\rho c_{pv}$ le rapport des capacités thermiques massiques, qui pilote l'inertie thermique d'une phase en rapport à l'autre.

Ensuite l'effet de la diffusivité thermique du liquide sur l'énergie est étudié, en gardant des rapports constants de propriétés thermiques liquide/vapeur. Ce paramètre reste dimensionné dans la mesure où cet écoulement ne définit pas vraiment un nombre de Reynolds car il n'y a pas de vitesse relative d'écoulement entre les deux phases et qu'un nombre de Prandtl ne peut pas vraiment être défini pour la même raison.

L'étude de perte d'énergie en fonction des rapports de λ et de ρc_p est réalisée sur la grille de paramètres présentée Tab. 4.7. Cette grille ne couvre que la partie où la vapeur est plus conductive et présente une plus grande inertie que le liquide. Cela peut paraître surprenant, mais cela répond à notre volonté de simuler du changement de phase en forçant la température à être constante et uniforme dans les bulles par des propriétés particulières.

La Fig. 4.30 représente la perte d'énergie relative dans la simulation au bout de 0,20 s selon la grille de paramètres. Ces simulations sont réalisées pour $\kappa_l = 7,83 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$. Plusieurs choses peuvent être remarquées.

- D'abord, quand le rapport de capacité thermique est de 1,00, il n'y a quasiment aucune perte d'énergie. Cela confirme que la perte d'énergie vient de la division par ρc_{pa} dans l'Éq. (5.25).
- Ensuite, l'évolution de la perte d'énergie n'est pas monotone en fixant l'un des deux paramètres. Elle semble donc difficile à interpréter en tant que valeur intégrée sur le domaine.
- Enfin, une tendance se dégage tout de même : pour une valeur suffisamment faible du rapport de conductivité thermique, plus celle-ci est petite, plus les

TABLEAU 4.7 – Grille des rapports de conductivité et de capacité utilisés. Le cercle représente les rapports visés.

	$\rho c_{pl}/\rho c_{pv}$				
	0,001	0,01	0,1	0,5	1,0
λ_l/λ_v	1,00	✓	✓	✓	✓
	$1,00 \times 10^{-1}$	✓	✓	✓	✓
	$1,00 \times 10^{-2}$	✓	✓	✓	✓
	$3,55 \times 10^{-3}$	✓	✓	○	✓
	$1,00 \times 10^{-3}$	✓	✓	✓	✓

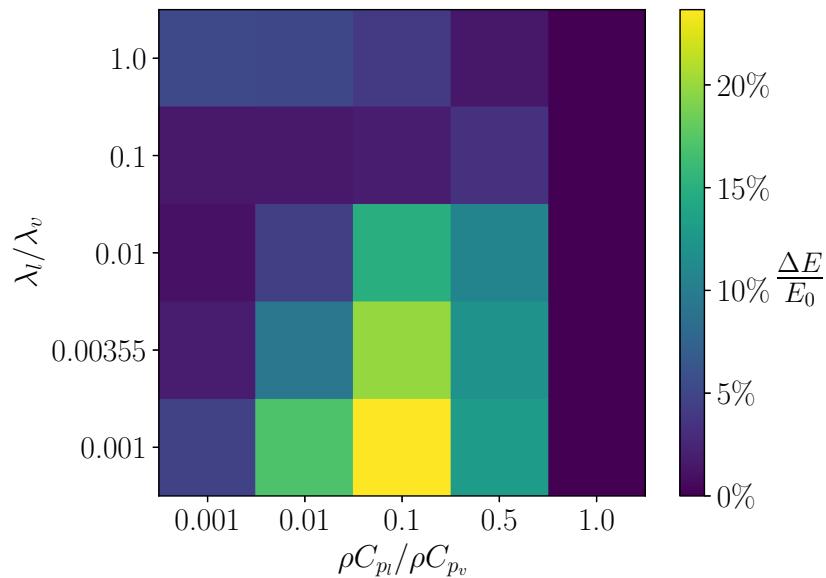


FIGURE 4.30 – Heatmap de la perte relative d'énergie selon les rapports de ρc_p et de λ au bout de 0,20 s.

pertes sont importantes.

Trois profils de température sont comparés sur la Fig. 4.31, associés à leur solution de référence (sur un maillage plus fin et sans convection) pour des rapports de λ différents avec le même rapport de capacité thermique. Plus ce rapport est important, plus le profil de température dans la bulle est symétrique. Cela est dû au fait que la diffusion étant plus importante dans la vapeur, la température est davantage forcée au même niveau. Mais si la forme symétrique est plus proche de la solution, cela se fait au détriment de la valeur de température. En effet il semble que la température dans la bulle est pilotée par la température la plus basse à l'interface. Ainsi, quand un déséquilibre numérique se produisait entre l'amont et l'aval de la bulle avec un certain λ , ce déséquilibre disparaît avec un λ plus fort, mais la solution s'aligne sur la valeur la plus basse (qui ne correspond pas à la température de référence).

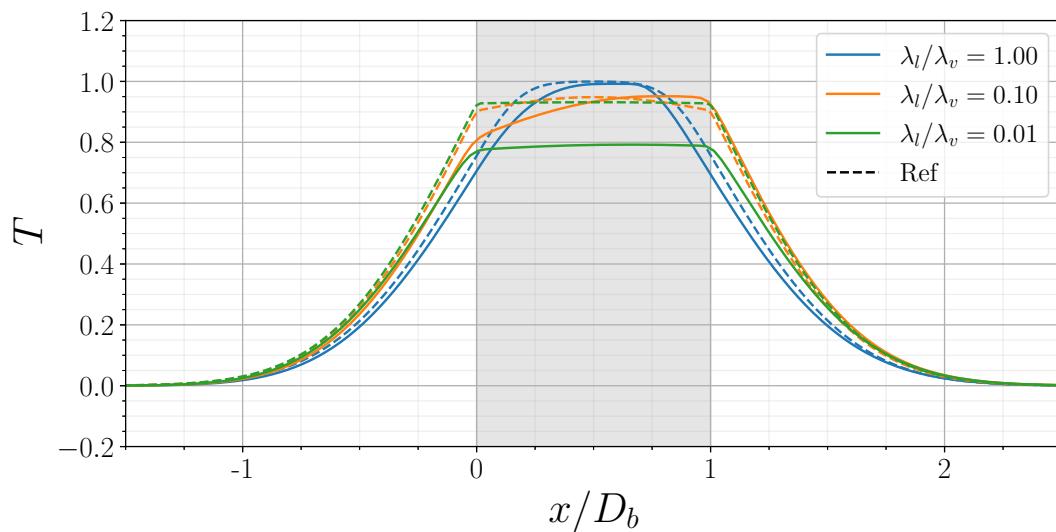


FIGURE 4.31 – Profils de température pour $\rho c_{pl}/\rho c_{pv} = 0.1$ au bout de 0,20 s.

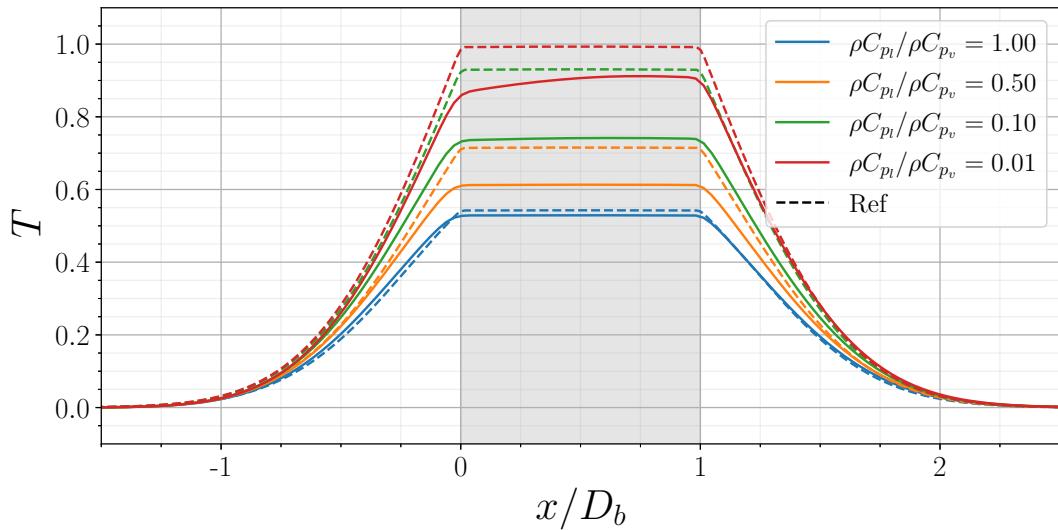


FIGURE 4.32 – Profils de température pour $\lambda_l/\lambda_v = 0.00355$ au bout de 0,20 s.

TABLEAU 4.8 – Valeurs de diffusivité thermique $\kappa_l = \lambda_l/\rho c_{pl}$ utilisées.

κ m^2/s
$7,83 \times 10^{-8}$
$3,91 \times 10^{-7}$
$7,83 \times 10^{-7}$
$1,57 \times 10^{-6}$
$3,91 \times 10^{-6}$
$7,83 \times 10^{-6}$

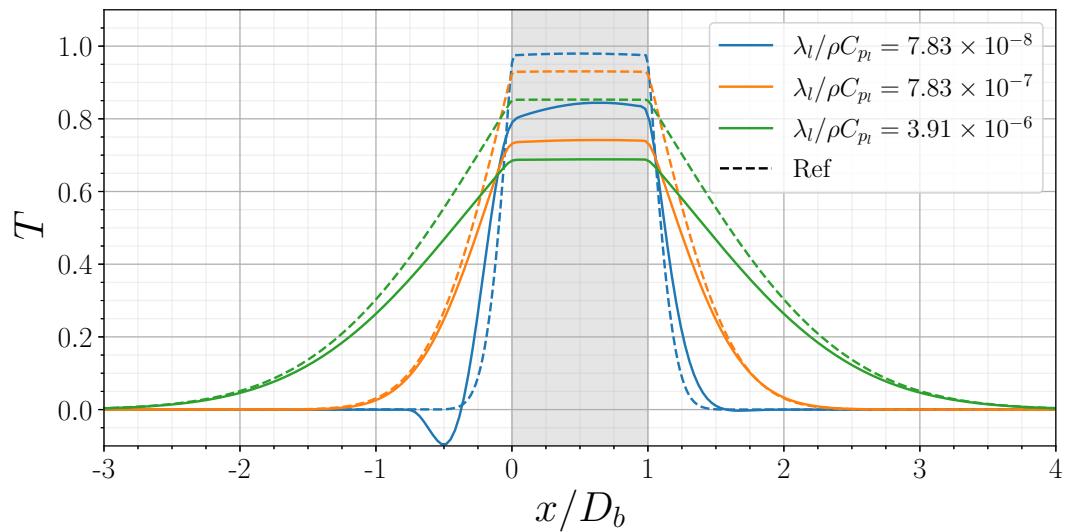


FIGURE 4.33 – Profils de température pour $\rho c_{pl}/\rho c_{pv} = 0.1$ et $\lambda_l/\lambda_v = 0.00355$ au bout de 0,20 s.

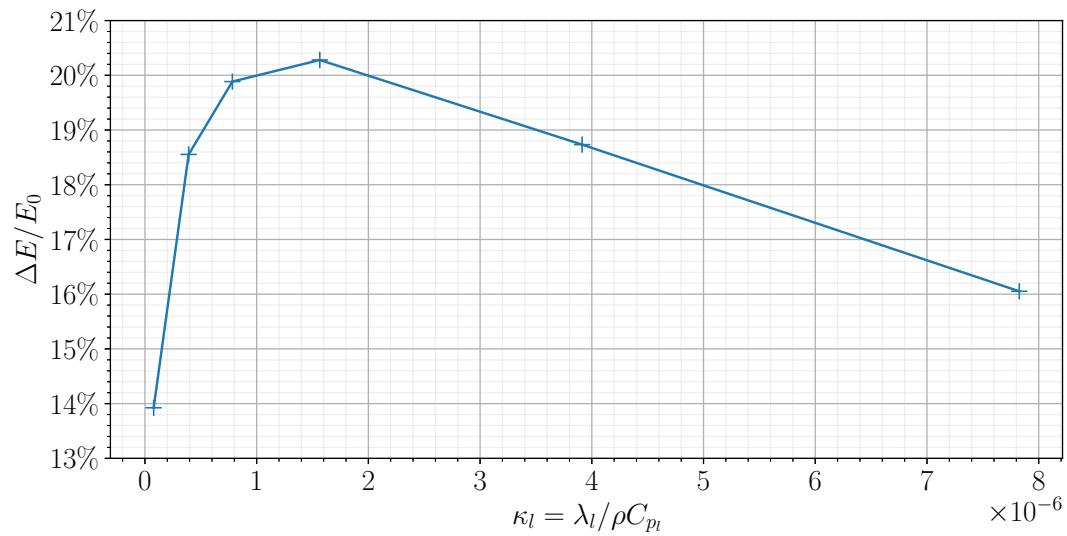


FIGURE 4.34 – Perte d'énergie en fonction de κ au bout de 0,20 s.

Conclusions

Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, la mise en place du code 1D FluidDyn est présentée. Ce code s'inscrit dans le cadre d'une recherche extensive sur les schémas numériques pour le front-tracking dans le cadre des transferts thermiques. L'architecture générale du code est exposée. Cette librairie permet de résoudre des problèmes diphasiques en front-tracking et utilise des schémas spatiaux volumes finis et temporels type Euler explicite ou Runge-Kutta d'ordre 3. Ces schémas sont validés dans des cas simples pour déterminer leur bon ordre de convergence. Puis un cas complet monophasique est étudié pour validation générale. Ensuite, plusieurs études sont menées dans un cas diphasique avec saut de propriétés et apportent des éclaircissements et des résultats nouveaux :

- La sur-contrainte du pas de temps n'apporte pas de convergence.
- La méthode de résolution de la formulation en température monofluide perd d'autant plus d'énergie que le rapport des λ est élevé à rapport de ρc_p constant.
- Quel que soit le jeux de paramètres choisis, la perte en énergie est importante et la convergence en maillage qui correspond à une résolution acceptable n'est pas atteignable avec une formulation monofluide.

FluidDyn est une base légère et souple qui sert à développer et valider de nouveaux schémas de convection-diffusion pour des écoulements à bulles. Ce code est utilisé Chap. 5 et Chap. 6 dans ce cadre.

Chapitre 5

Conservation de l'énergie dans les simulations à grand saut de propriétés thermiques

Sommaire du présent chapitre

Introduction	148
5.1 Mathematical formulation of the Temperature One-Fluid method (TOF)	152
5.1.1 Front-tracking method (FT)	152
5.1.2 Hypotheses on the flow dynamics	152
5.1.3 Temperature equation in the local one-fluid paradigm	154
5.1.4 Numerical resolution of the flow dynamics	155
5.1.5 Finite volume, formulation choices	156
5.1.6 Discretization, finite difference interpolation	157
5.1.7 Temporal integration	159
5.1.8 Heat diffusion around a single bubble	159
5.2 TOF formulation, a conservation issue	160
5.2.1 A homogeneous bubbly flow	160
5.2.2 A 1D periodic bubbly flow with heat transfer	163
5.3 New formulations: quest for conservative and accurate formulations	171
5.3.1 Improvement of the temperature equation integration in the temperature formulation	171
5.3.2 Energy formulation	178

5.3.3 Convergence order of the ESP mehtod	184
Conclusions	185

Introduction

Heat transfer simulations in turbulent bubbly flows take an increasing place in numerous domains, such as naval propulsion, vapour generation, simulation of accidents in nuclear power plant. This article concerns the numerical formulation of heat transfer calculations in incompressible bubbly flows without phase-change nor wall for large scale simulation, and especially the treatment of discontinuous properties. This kind of simulation consists in approximating the local variables of the flow at different times on a grid of points. In the case of a large scale simulation of a two-phase flow, the interface is also simulated. The interface calculation, in order to treat discontinuities is of primary importance. Several methods are actively used and none of them seem to take precedence in the literature. Few methods are purely Eulerian, and does not rely on the interface position [26], but they present interface diffusion issues. The most widespread sharp method is the Volume of Fluids (VOF), introduced by Hirt and Nichols [39]. In this method, a colour function (with a value of one in the liquid and zero in the gas) is convected. It holds great simplicity, and it regularizes the discontinuous properties, allowing a stable resolution. But this regularization is artificial, so the interface needs a reconstruction method. Various improvements of this method have been proposed [59], [1], [68], [57]. To improve the interface tracking, Tanguy et al. [86] and Tryggvason, Scardovelli, and Zaleski [97] refer to the level set (LS) method. In this paradigm, the interface is represented by a signed 3D distance function. This function is also convected. Different variations of this method exist, such as the coupling of VOF and LS by Sussman et al. [81], or the CLS method by Olsson and Kreiss [66] and Olsson, Kreiss, and Zahedi [67], or ACLS by Desjardins, Moureau, and Pitsch [24] and Desjardins and Moureau [23]. Some efforts have also been made to develop this method on unstructured grids by Balcázar et al. [4].

Benchmarks of the different methods was done by Boniou, Schmitt, and Vié [12] and Tanguy et al. [85]. Both VOF and LS are used with various interfacial reconstruction possibilities. The most common reconstruction is the PLIC (Piecewise Linear Interface Construction) method presented by Youngs [101]. Higher order reconstructions were proposed by Scardovelli and Zaleski [78]. A benchmark of different interface reconstruction methods was done by Aulisa et al. [3]. Those methods are not used in this article, but some numerical schemes are inspired from them. Another popular interface calculation method is the front-tracking (FT) method developed by Glimm et al. [36, 35], and further improved by Undverdi and Tryggvason [98], Tryggvason et al. [96], and Tryggvason, Scardovelli,

and Zaleski [97]. Its advantages are the precise description of the front for the calculation of surface tension forces and the control over topological changes; it does not need an interface reconstruction method afterwards. Thus, it holds greater precision. Besides, the phase indicator function and physical properties can be considered sharply, without artificial thickening further than the cell size. The drawbacks mainly consist in the difficult implementation of the algorithm and its computational cost. In this method, the interface localization is known with high precision, but the evolution of discontinuous properties is not synchronized with the evolution of volumetric fields (such as velocity or temperature). This leads to a conservation issue or even instabilities in some schemes, as we shall see respectively in Sec. 5.2.1 and 5.3.1.

In addition to the choice of the numerical method to deal with the interface a discretization has to be chosen. Some use a modified Finite Element Method to tackle the discontinuity and conservation issues such as Garajeu and Medale [33]. This method has a good geometrical flexibility in three-dimensional cases with a good accuracy. In this article the finite volume (FV) method is considered, it is one of the most common methods used. It has the property to conserve the transported value. The equations are integrated over small volumes (in our case, a regular mesh of hexahedral volumes in 3D), divergence terms are changed into the integral of fluxes over the faces of the cell (thanks to Gauss's theorem). This is fully illustrated in Sec. 5.1. The other classical method used is the finite difference method [25, 12, ...].

The discontinuity of the fluid properties across the interface can be handled with different methods. Usually, the grid discretization does not correspond to the interface localization. When an interfacial condition has to be satisfied across the interface, the ghost-fluid method is commonly used to tackle the discontinuity of velocity for compressible or incompressible flows with phase change. The ghost-fluid method was introduced by Fedkiw et al. [31] and applied to the VOF paradigm. It was later improved in [2], [24] and [51]. It was also successfully adapted to the LS framework by Tanguy, Ménard, and Berlemont [84] and Gibou et al. [34], and enhanced by Li et al. [51]; Terashima and Tryggvason [87] and Donghong et al. [28] introduced it in the FT framework. Another method to treat interface conditions is the one-fluid integrated formulation described in Prosperetti and Tryggvason [73], Toutant et al. [90] and [62] and used in [7]. In this method, fluid properties are expressed as a continuous function of the volume fraction of the fluid in the cell. This method is at the foundation of some formulations presented in this article.

All those methods have to tackle the issue of thermal energy conservation, which is particularly difficult to attain in heat transfer because of the jump of properties at the interface. Several studies and proposition were made, but mostly

with a VOF method and with phase change [57, 103]. The aim of the article is to present the limitations of various formulations in the finite volume front-tracking framework, and to propose improvements. By formulation, we do not mean the specific discretization used to interpolate the values where needed, but rather the way the local thermal equation is written just before its integration on a cell volume (finite volume method) and in time. As represented on Fig. 5.1, a complete formulation involves multiple coherent choices and approximations. At each step, several choices are possible. This complexity is mainly due to the discontinuity of the fluid properties. The issue of thermal energy conservation can be compared to the conservation of momentum in simulations where there is a discontinuity of density and viscosity which has been a topic of more publications [57, 24, 99] in particular for studies on droplets or liquid jet fragmentation. Some simulations were made with a jump of thermal properties ($\mathcal{O}(10 - 50)$) in Dabiri and Tryggvason [21]), especially in the field of thermocapillary simulations (Nas and Tryggvason [64] and Nas, Muradoglu, and Tryggvason [63]). But these simulations do not specifically concern heat transfer at the interfaces, nor directly observe the conservation of thermal energy. Ma and Bothe [56] propose a solution in the VOF scheme to suppress the energy conservation issue, and analyse a simulation using this scheme for a small discontinuity ratio of heat mass capacity and conductivity (1/2).

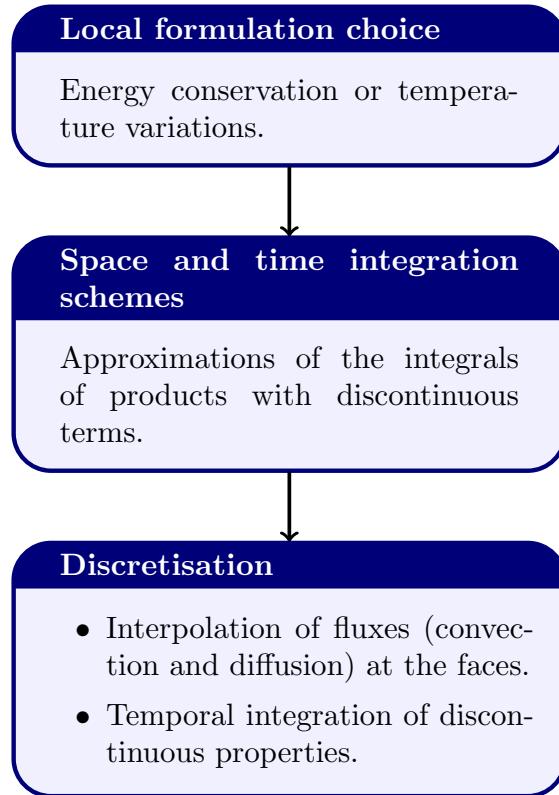


Figure 5.1 – Steps necessary to get a coherent formulation

The paper is organized as follows. In the first part, the classical one-fluid formulation is presented for heat transfer resolution (Sec. 5.1). Then, in Sec. 5.2 several 3D simulations are done in this paradigm using TrioCFD-IJK [95] to demonstrate first the improvement of the one-fluid formulation in a purely diffusive case, and second the drawbacks of this formulation on the thermal energy conservation when convection is also involved. In Sec. 5.2.2 this observation is reproduced with a 1D code FluidDyn [80], which aims to test and evaluate easily several formulations. Different tests are made in order to characterize the origin of the energy loss: one on the effect of different space interpolation schemes and one on the evolution of the energy loss depending on the space and time steps. Finally, in Sec. 5.3, several new formulations are presented in the front-tracking, finite volume paradigm; they are tested on the same case as in Sec. 5.2 and compared with each other.

5.1 Mathematical formulation of the Temperature One-Fluid method (TOF)

In this section, a complete formulation and the process to obtain it is presented. This formulation is a way to compute the evolution of the temperature field in a one-fluid paradigm with a staggered grid representation. Few improvements are made from the classical one-fluid formulation presented by Tryggvason, Scardovelli, and Zaleski [97], see Eq. (5.19). Their benefits are illustrated in Sec. 5.1.8.

5.1.1 Front-tracking method (FT)

The FT method is used in direct numerical simulations of bubbly flows with a growing success. It brings more complexity than LS methods, which explains why it is less widespread, but it can reach more accuracy. FT does not lead to numerical diffusion of the interface position and discontinuities can thus be considered sharply, without smearing. This method consists in using a Lagrangian mesh, made of triangular elements, to represent the interface between liquid and gas phases (see Fig. 5.2). The markers of this mesh are moved by interpolating the velocity from the Eulerian mesh to the Lagrangian mesh. Then, the phase indicator function, computed on the Eulerian mesh, is calculated according to the volume rate of each phase in each cell. To know where the liquid and gas are, an algorithm of connex components is used. Thus, the indicator is 1 in the bubble, 0 outside, and has an intermediate value in cells crossed by the interface. The treatment of those so-called two-phase cells is of great importance as shall be seen in the rest of the paper. Indeed, it is necessary to prevent the diffusion of the physical characteristics between the two phases. The phase indicator function χ_k , with the indices k corresponding to the phase in which the indicator equals one, is governed by the following transport equation:

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \underline{v}_k \cdot \nabla \chi_k = 0 \quad (5.1)$$

5.1.2 Hypotheses on the flow dynamics

In each phase For the flow dynamics, the following phenomena are considered in each phase:

- The fluid is incompressible, the divergence of the velocity field is therefore zero.

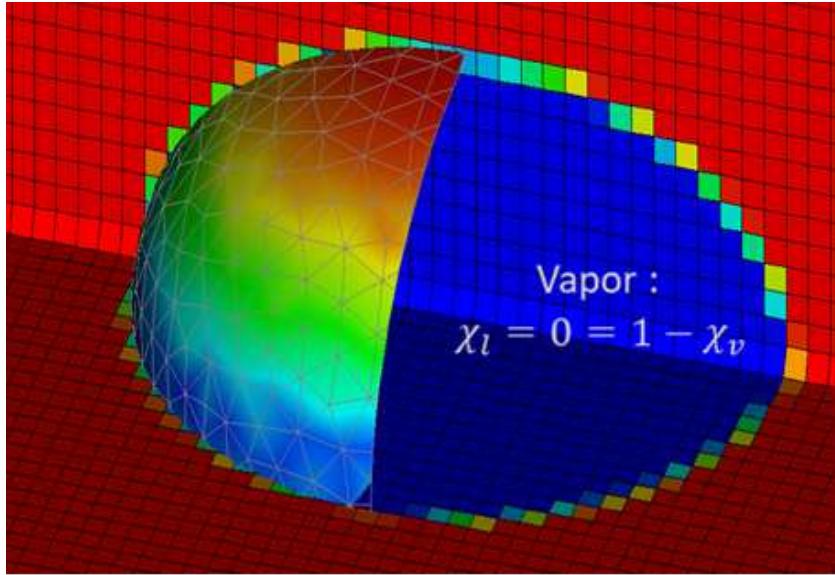


Figure 5.2 – Lagrangian mesh over the bubble and slices of the Eulerian mesh, coloured respectively by the curvature and integrated phase indicator function.

- The viscous force follows Newton's law of proportionality to the stress tensor.
- Gravity acts in a constant and uniform manner.
- There is no phase-change and the temperature has no effect on the flow dynamics, so the density and the viscosity are constant and uniform per phase. Such flows have the advantage of making the velocity and interfaces independent of the thermal fields. Thus for the same flow dynamics, depending on the material properties of the bubble phase and the liquid phase, different thermal solutions are obtained.

Navier-Stokes equations in each phase under these assumptions are written:

$$\nabla \cdot \underline{v}_k = 0, \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial \rho_k \underline{v}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \underline{v}_k \underline{v}_k) = -\nabla p + \rho_k \underline{g} + \nabla \cdot (\mu_k \nabla \underline{v}_k). \quad (5.3)$$

At interfaces The surface tension force is characterized by a constant and uniform surface tension coefficient σ on the surface of the bubbles. This coefficient is supposed independent from the temperature, because of the nature of the flow we aim to model in future works: a boiling flow. Consequently, Marangoni's effects are not considered.

Consequences Under those hypotheses, the conditions at the interfaces on the velocity field and the mass field are the following.

- Because of the viscosity, there is continuity of the tangential speed.
- As there is no phase change, the normal speed at the interface is continuous.
- As the flow is also incompressible, there is no volume change of the simulated liquid and gas in the domain.

These relations are written as follows,

$$\underline{v}_I = \underline{v}_{v_I} \quad (5.4)$$

$$\sum_k \underline{\mathcal{T}}_k \cdot \underline{n}_{k_I} = \sigma \kappa \underline{n}_{v_I}, \quad (5.5)$$

with $\underline{\mathcal{T}}_k = -p_k \underline{I} + \mu_k (\nabla \underline{v}_k + \nabla^\top \underline{v}_k)$ the stress tensor, $\kappa = \nabla_s \cdot \underline{n}_{v_I}$ the local interface curvature and \underline{n}_{v_I} the normal vector to the interface directed towards the liquid phase.

5.1.3 Temperature equation in the local one-fluid paradigm

In this section, we focus only on the description of the evolution of the temperature field. The complete set of equations fully describing the evolution of the two-phase mixture is given in Sec. 5.2.1 by the equation system (5.26). Under the hypothesis that

- the thermal energy production due to viscous dissipation is neglected,
- the conductive heat flux can be written using the Fourier law $\underline{q}_k = -\lambda_k \nabla T_k$,

one can write in phase k :

$$\frac{\partial T_k}{\partial t} + \nabla \cdot (T_k \underline{v}_k) = \frac{1}{\rho_k c_{p_k}} \nabla \cdot (\lambda_k \nabla T_k) \quad (5.6)$$

The corresponding interfacial jump conditions associated to this temperature transport equation are given by the temperature continuity

$$T_k|_I = T_I \quad (5.7)$$

and the equality of interfacial fluxes:

$$\sum_k \lambda_k \nabla T_k|_I \cdot \underline{n}_{k_I} = 0 \quad (5.8)$$

The interfacial jump of normal velocity is null in this case because phase change is not considered:

$$\sum_k \underline{v}_k \cdot \underline{n}_{kI} = 0 \quad (5.9)$$

One-fluid variables are defined over the whole domain (over both phases) by

$$\begin{aligned} T &= \sum_k \chi_k T_k & \lambda &= \sum_k \chi_k \lambda_k \\ \rho c_p &= \sum_k \chi_k \rho_k c_{pk} & \underline{v} &= \sum_k \chi_k v_k \end{aligned} \quad (5.10)$$

in order to obtain the following equation using Eq. (5.1) and after applying the interfacial jump conditions (5.7), (5.8) and (5.9):

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T \underline{v}) = \frac{1}{\rho c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (5.11)$$

This method was introduced by Kataoka [44] for the equation of movement and the same method was used on the temperature field by Morel [62].

5.1.4 Numerical resolution of the flow dynamics

The one-fluid Navier-Stokes equations are written as follows:

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad (5.12)$$

$$\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v} \underline{v}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\mu (\nabla \underline{v} + \nabla^\top \underline{v})) + \underline{g} - \frac{1}{\rho} \sigma \kappa \underline{n}_{v_I} \delta_I \quad (5.13)$$

These equations are discretized and solved in finite volumes. The finite volume form of the one-fluid momentum equation Eq. (5.13) is written:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_{dV} \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} dV &= \frac{1}{V} \left(- \oint_S \underline{v} \underline{v} \cdot \underline{n} dS \right. \\ &\quad + \frac{1}{\rho_a} \oint_S (\mu (\nabla \underline{v} + \nabla^\top \underline{v}) - p \underline{I}) \cdot \underline{n} dS \\ &\quad \left. + \int_V \underline{g} dV - \frac{1}{\rho_a} \int_{S_I} \sigma \kappa \underline{n}_I dS \right), \end{aligned} \quad (5.14)$$

with V the volume of a dual cell, S its closed surface, S_I the interfacial area contained in the dual cell and ρ_a the arithmetic averaged density in a dual cell. As explained in Cluzeau, Bois, and Toutant [18], the Navier-Stokes equations are

then solved by a projection method (Puckett et al. [74]) using respectively fourth-order and second-order central differentiations for evaluation of the convective and diffusive terms on a fixed, staggered Cartesian grid. Fractional time stepping leads to a third-order Runge–Kutta scheme (Williamson [100]). In the two-step prediction–correction algorithm, a surface tension source is added to the main flow source term and to the evaluation of the convection and diffusion operators in order to obtain the predicted velocity (see Mathieu [60] for further information). The surface tension is computed geometrically from the mesh curvature based on the surface divergence of the interface normal vector. Then, an elliptic pressure equation is solved by an algebraic multigrid method to impose a divergence-free velocity field. TrioCFD has already been used for two-phase (Toutant et al. [94], Toutant et al. [92, 93], Toutant, Mathieu, and Lebaigue [91], Bois et al. [11], Bois and Cluzeau [10], Bois [8], and Cluzeau, Bois, and Toutant [18]) and single-phase (Chandesris and Jamet [16] and Dupuy, Toutant, and Bataille [30]) flow studies.

5.1.5 Finite volume, formulation choices

In this part, details of the numerical schemes are discussed, with a particular emphasis on the interpolation of the discontinuous variables such as physical properties. The finite volume methods consist in integrating the diffusion convection equation (5.11) over each control volume. The integrated values are later assimilated to the values at the centre of the cell to calculate the values at the faces (convective and diffusive fluxes). The integration of Eq. (5.11) over a control volume V_{cell} using Gauss's theorem gives

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = -\frac{1}{V_{cell}} \oint_{S_{cell}} T \underline{v} \cdot \underline{n} dS + \frac{1}{V_{cell}} \int_{V_{cell}} \frac{1}{\rho c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) dV \quad (5.15)$$

with $T_m = 1/V_{cell} \int_{V_{cell}} T dV$ the mean temperature on a control volume. But in this expression, the diffusive term is not expressed as the integral of a flux over a surface. In order to do so, the following approximation is used

$$\int_{V_{cell_k}} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) dV \approx I_k \int_{V_{cell}} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) dV \quad (5.16)$$

which leads to

$$\int_{V_{cell}} \frac{1}{\rho c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) dV = \frac{1}{\rho c_{ph}} \int_{V_{cell}} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) dV \quad (5.17)$$

where $I_k = 1/V_{cell} \int_{V_{cell}} \chi_k dV$ is the volume rate of phase k in the cell, and ρc_{ph} is the harmonic mean of the mass heat capacity defined by:

$$\frac{1}{\rho c_{ph}} = \frac{I_l}{\rho c_{pl}} + \frac{I_v}{\rho c_{pv}} \quad (5.18)$$

To the best of our knowledge, this expression is original, the usual mean used being a classical arithmetic mean, $\rho c_a = I_l \rho c_{pl} + I_v \rho c_{pv}$. This new expression is used with success in simulations without convection (on a comparison with Panda et al. [69], see Sec. 5.1.8). Finally, the diffusive term is expressed as

$$\frac{1}{\rho c_{ph}} \oint_{S_{cell}} \lambda \nabla T \cdot \underline{n} dS \quad (5.19)$$

which leads to the following finite-volume integration of the temperature equation:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = -\frac{1}{V_{cell}} \oint_{S_{cell}} T \underline{v} \cdot \underline{n} dS + \frac{1}{V_{cell}} \frac{1}{\rho c_{ph}} \oint_{S_{cell}} \lambda \nabla T \cdot \underline{n} dS \quad (5.20)$$

5.1.6 Discretization, finite difference interpolation

Once the simplification of the diffusion is made, one has to express the convective and diffusive fluxes as functions of the mean temperature over the control volume of several cells. In the framework of the staggered grid finite difference method, the scalar values (pressure, temperature, physical properties, phase indicator, etc.) are represented at the cell centres, and their space derivatives are located at the faces of the elementary volumes. Thus, the velocity is at the faces of those elements whereas the temperature is located at their centre. Hence, in Eq. 5.21, because of the staggered representation, the interpolation of the different fluxes has to be chosen

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = -\frac{1}{V_{cell}} \sum_f T_f v_f S_f + \frac{1}{V_{cell} \rho c_{ph}} \sum_f q_f S_f \quad (5.21)$$

with the indices f indexing the faces of the cell, $v_f = \underline{v}_f \cdot \underline{n}_f$ and $q_f = (\lambda \nabla T)_f \cdot \underline{n}_f$.

Convection To calculate the convective term $\int_{V_{cell}} \nabla \cdot (T \underline{v}) dV = \oint_{S_{cell}} T \underline{v} \cdot \underline{n} dS$ at the faces (S) it is necessary to interpolate the temperature from the centres of the volumes to the faces. The integral is calculated as: $\oint_{S_{cell}} T \underline{v} \cdot \underline{n} dS \approx \sum_f T_f v_f S_f$ with $v_f = \underline{v}_f \cdot \underline{n}_f$. The following numerical schemes are used in the rest of the article to calculate T_f :

- The *upwind* scheme is the lowest order stable scheme for convection. It has

the advantage of being non-oscillatory and stable, but it leads to a very large numerical diffusion compared to higher order schemes. It is also used by Boniou, Schmitt, and Vié [12] near the interfaces.

- The *QUICK* scheme uses a stencil of size 3. It takes into account 2 upstream values and one downstream. Thus, to interpolate the value at face $i + 1/2$ if the velocity component is positive in this direction, the values of cells $\{i-1; i; i+1\}$ are used. The interpolation is non-linear as it is corrected by slope limiters. It was introduced by Leonard [50].
- The *WENO* scheme uses a stencil of size 5 and is non-oscillatory, which gives it an advantage over the *QUICK* type scheme. In the case where the velocity is positive at face $i + 1/2$, the temperature is interpolated at this location using the values of the cells $\{i - 2; i - 1; i; i + 1; i + 2\}$. Three linear interpolations are calculated with the stencils $\{i - 2; i - 1; i\}$, $\{i - 1; i; i + 1\}$ and $\{i; i + 1; i + 2\}$. Then, non-linear coefficients are calculated to weight the results of those 3 interpolations and form the final value. It was introduced by Liu, Osher, and Chan [52], [102].

Diffusion The diffusive term is written as the product of the facial harmonic mean of the thermal conductivity λ_{hf} and the temperature gradient $\nabla_f T$. The values of λ_h and T_m are known at cell centres. Face values λ_{hf} and $\nabla_f T$ must be deduced from them. The treatment of λ_f is handled in the part on discontinuous properties below. For the assessment of the discontinuous temperature gradient at the face $\nabla_f T$, a centred linear discretization of order 2 is used as described in Eq. (5.22). This scheme is classical for a discretization of a gradient to faces. It has a stencil of size two.

$$\nabla_f T = \frac{T_{m_{i+1}} - T_{m_i}}{\Delta x} \quad (5.22)$$

Discontinuous properties The interpolation of the thermal conductivity λ to faces is done with the following method. First, the value of the conductivity at the cell centre is chosen such that $1/\lambda_h = I_l/\lambda_l + I_v/\lambda_v$ where the subscript h denotes the harmonic mean as stated by Patankar [70]. Then, this variable is evaluated at multiple cell centres, which are marked with the subscript i . Finally, the value of the thermal conductivity λ can be interpolated from the cell centres with a second order harmonic centred interpolation as in Eq. (5.23). This scheme is particular in the case of interpolation of the conductivity which is piecewise constant and strongly discontinuous. Actually it corresponds to the harmonic mean of λ using a linear interpolation of the void fraction at the face.

$$\lambda_{hf} = 2 \frac{\lambda_{h_i} \lambda_{h_{i+1}}}{\lambda_{h_i} + \lambda_{h_{i+1}}} \quad (5.23)$$

In this formulation, $1/\rho c_{ph}$ does not require interpolation because it is needed at cell centres.

5.1.7 Temporal integration

In direct simulations of interfacial flows, time integration is usually explicit due to the natural limitations of the sharp properties' variations that strongly constrains the time step. For more accuracy a third-order Runge-Kutta method with low memory borrowing from Williamson [100] is used, but in this article for the simplicity of the notations all temporal discretizations are written using the Euler explicit scheme. Moreover, all results presented use the Euler scheme when it is not specifically expressed otherwise. The time step is limited by the CFL and Fourier numbers.

Integrating Eq. (5.21) over a time step Δt , one gets:

$$T_m^{(n+1)} - T_m^{(n)} = -\frac{1}{V_{cell}} \int_{\Delta t} \sum_f T_f v_f S_f dt + \frac{1}{V_{cell}} \int_{\Delta t} \frac{1}{\rho c_{ph}} \sum_f \lambda_{hf} \nabla_f T S_f dt \quad (5.24)$$

After discretization with an Euler time scheme, Eq. (5.24) becomes:

$$T_m^{(n+1)} - T_m^{(n)} = -\frac{1}{V_{cell}} \sum_f T_f^{(n)} v_f^{(n)} S_f \Delta t + \frac{1}{V_{cell}} \frac{1}{\rho c_{ph}^{(n)}} \sum_f \lambda_{hf}^{(n)} \nabla_f T^{(n)} S_f \Delta t \quad (5.25)$$

5.1.8 Heat diffusion around a single bubble

In this section a 3D simulation of a single bubble was made. The set-up is the same as that presented by Panda et al. [69]. The whole simulation is without velocity as the bubble is static. Initially the temperature of the bubble is different from the temperature of the surrounding fluid. A thermal property jump is set between the bubble and the fluid. As the simulation is symmetric, the results are shown along the radius of spherical coordinates. The simulation was made in order to test the different possibilities of means (arithmetic and harmonic) in the TOF formulation and their effects. A temperature reference solution was computed in 1D with the semi-analytical method described in [69]. The temperature is initialized at $T_0 = 373K$ and $T_1 = 273K$. The time step for the 1D case (in spherical coordinates) is chosen to be $\Delta t_{1D} = 2,00 \times 10^{-4}s$ and is coupled with a grid resolution $D_b/\Delta r = 80$ which has led to convergence according to Panda et al. [69].

In these simulations the heat transfer properties, i.e. the thermal conductivity λ and the mass heat capacity ρc_p are constant and uniform in each phase. The profiles of temperature at different times are reported on Fig. 5.3. The grey part

corresponds to bubble's inside while the white part is for the surrounding fluid. In Figs. 5.3a and 5.3c, the ratio of thermal conductivity is $\lambda_{in}/\lambda_{out} = 200$ ("in" means inside the spherical grey part, *i.e.* $r < D_b$ or $\tilde{r} < 1$) and the heat capacity is constant. In Figs. 5.3b and 5.3d, the ratio of heat capacity is $\rho c_{p,out}/(\rho c_{p,in}) = 200$ and the thermal conductivity is constant. Those ratios are chosen so that the temperature in the phase $r > D_b$ stays almost constant and that the interfacial temperature is close to the bubble temperature.

Figure 5.3 clearly shows that the harmonic mean of $1/\rho c_p$ (see Eq. (5.20)) gives good results, contrary to the arithmetic one.

5.2 TOF formulation, a conservation issue

At first, the lack of conservation of the integrated TOF formulation is shown on a 3D homogeneous bubbly flow in Sec. 5.2.1. Then, in Sec. 5.2.2, a similar one dimensional simulation with temperature convection and diffusion is made in order to demonstrate that this case induces an equivalent energy loss. It justifies the use of one-dimensional simulations in this paper, in particular to study the effect of the convection interpolation scheme (Sec. 5.2.2) and to characterize mesh convergence (Sec. 5.2.2). Those analyses lead to the conclusion that the use of a better scheme with a finer mesh is not sufficient to achieve a reasonable energy conservation in cases with large property discontinuities.

5.2.1 A homogeneous bubbly flow

This simulation was made in the objective to quantify the conservativeness of the TOF method in the bulk of bubbly flows.

The hypotheses stated in Sec. 5.1.3 lead to the following one-fluid equation system

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \chi_k &= 0 \\ \nabla \cdot \underline{v} &= 0 \\ \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v} \underline{v}) &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \underline{g} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\mu (\nabla \underline{v} + \nabla^\top \underline{v})) + \frac{1}{\rho} \sigma \kappa \underline{n} \delta_I \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T \underline{v}) &= \frac{1}{\rho c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \end{aligned} \right\} \quad (5.26)$$

with p the pressure, \underline{g} the gravity acceleration, μ the dynamic viscosity, σ the surface tension coefficient and κ the bubble local curvature. It is important to note that the only choice in the equation system (5.26) that has a consequence

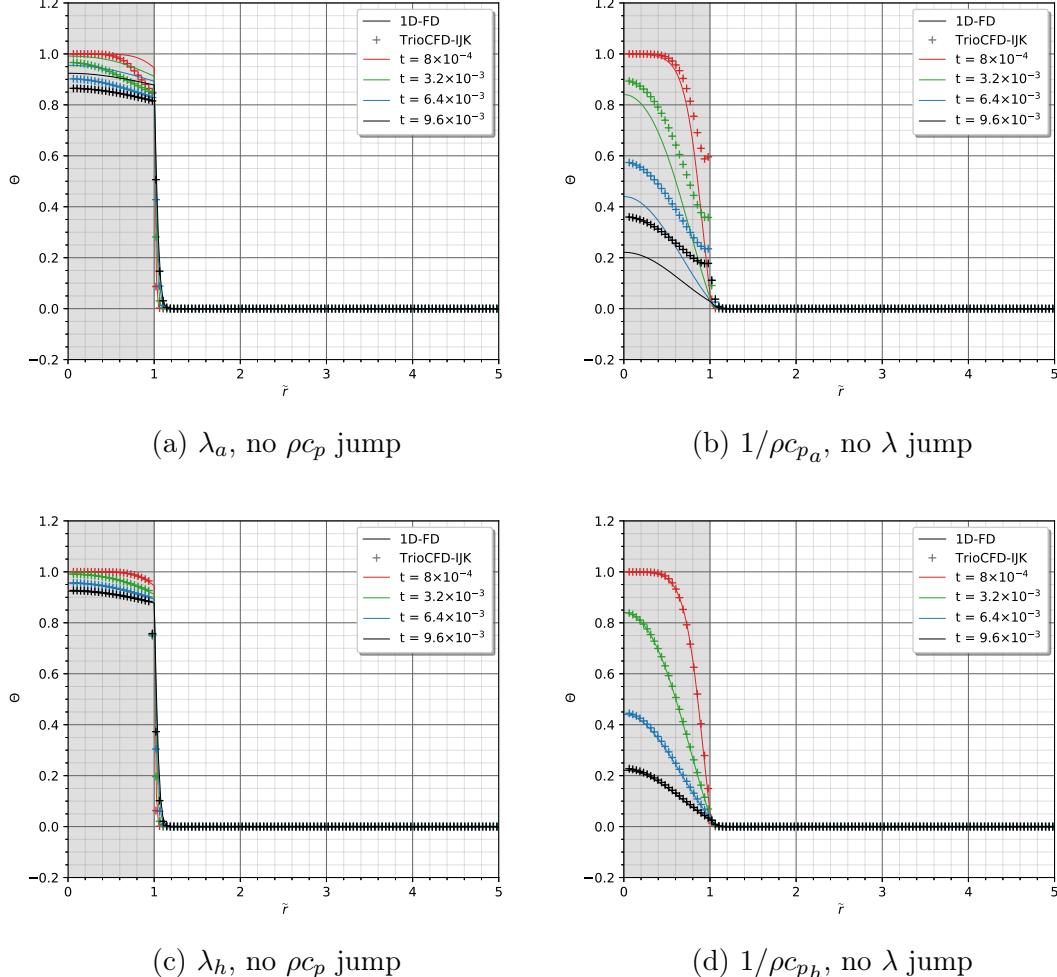


Figure 5.3 – Study of the impact of the use of arithmetic or harmonic means for $1/\rho c_p$ and λ . $\tilde{r} = r/D_b$ is the non-dimensional radius and Θ is the non-dimensional temperature. The temperature profiles are represented at different simulation times (s) both using TrioCFD-IJK and the semi-analytical solution (1D-FD presented by Panda et al. [69]).

over the study of the formulation for the temperature equation is that of the incompressibility.

Set up

Geometry The simulation is periodic in any direction and the computational domain is described in Tab. 5.3.

Initial conditions Initially the velocity field was established without any temperature field calculation. Bubbles were uniformly distributed to create a void fraction of $\alpha = 6\%$ (see Tab. 5.2). The temperature is initially set unity in the bubbles and zero in the liquid.

Parameter values The set-up was chosen so that the temperature in the bubble remains more or less constant, *i. e.*, with a higher diffusivity and heat capacity in the bubbles than in the liquid. Parameters are constant by phase and reported in Tab. 5.1. The subscript b stands for “bubble”. For the flow dynamics, parameters are identical to the case at $Re_b = 400$ in Cluzeau et al. [20], with $Re_b = \rho_l u_r D_b / \mu_l$ and u_r the mean relative velocity between the liquid and the gas ($_l$ denotes a liquid value). In Tab. 5.2, the Eötvös number ($Eo = \Delta \rho g D_b^2 / \sigma$) refers to the deformation capacity of the bubbles, the Prandtl number ($Pr_l = c_{pl} \mu_l / \lambda_l$) characterizes the thermal diffusivity with respect to the dynamic diffusivity and α_v is the void fraction of the gas ($_v$ denotes a gas value). Finally, numerical parameters are reported in Tab. 5.3, the timestep is chosen such that the Fourier number $Fo = \lambda_{\max} \Delta t / (\rho c_{p_{\min}} \Delta x^2)$ and the Courant number $CFL = u \Delta t / \Delta x$ are lower than 1.

	Liquid	Gas
ρ (kg m ⁻³)	$1,17 \times 10^3$	$8,75 \times 10^1$
μ (Pas)	$3,53 \times 10^{-4}$	$1,35 \times 10^{-5}$
λ (W m ⁻¹ K ⁻¹)	$5,54 \times 10^{-2}$	$1,54 \times 10^1$
c_p (J kg ⁻¹ K ⁻¹)	$6,03 \times 10^1$	$8,07 \times 10^3$
σ (N m ⁻¹)		$1,81 \times 10^{-2}$
g (m s ⁻²)		9,81
D_b (m)		$1,00 \times 10^{-3}$

Table 5.1 – Physical parameters

Re_b	Eo	$\frac{\rho_l}{\rho_v}$	$\frac{\mu_l}{\mu_v}$	Pr_l	Pr_v	$\frac{\rho_l c_{pl}}{\rho_v c_{pv}}$	α_v
400	0.636	13.4	26.2	0.384	0.00705	0.1	6%

Table 5.2 – Dimensionless quantities

n_x	n_y	n_z	N_b	L_x (m)	L_y (m)	L_z (m)	$D_b/\Delta x$
512	128	128	57	0.02	0.005	0.005	25.6

Table 5.3 – Numerical values

Results and analysis

To exploit this DNS, statistics are taken in space (average according to the 3 spatial directions) for each phase. The time evolution of the temperature of each phase and of the Nusselt number are illustrated in Fig. 5.4. This simulation shows that the temperatures converge towards each other; this leads to decreasing heat flux and Nusselt number with time.

$$Nu(t) = \frac{\int_{A_b} q \cdot \underline{n} dSD_b}{\lambda_l \Delta T_0 A_b} \quad (5.27)$$

with A_b the total area of the bubbles interface, D_b their mean diameter and $\Delta T_0 = T_{l_0} - T_{v_0}$ the mean temperature difference between the phases at time t_0 .

The energy present in the channel $E_{tot} = \int_{V_{tot}} \rho c_p T dV$ is represented as a function of time in Fig. 5.5. A very significant part of the energy is lost (about 50%).

This energy loss is far too important and it motivates further studies to find more conservative formulations as proposed in the following.

5.2.2 A 1D periodic bubbly flow with heat transfer

In order to propose and test various formulations in this one-dimensional configuration, a light research code was written in the form of a python library, called FluidDyn, destined to solve one-dimensional flows using the front-tracking and finite volume frameworks. In the following, simulations are done with FluidDyn.

The velocity v is considered constant, the bubbles are marked by 1D discontinuous functions computed as two markers for each Heaviside associated to a bubble.

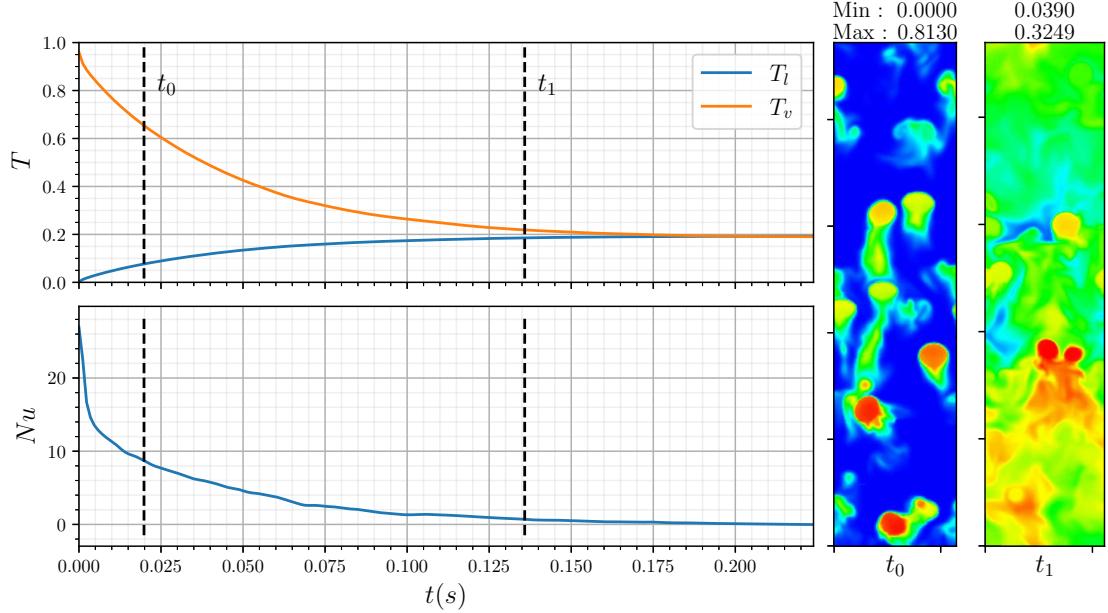


Figure 5.4 – Phase temperature and Nusselt number evolution in a homogeneous bubbly flow as a function of time.

The domain is periodic. The only equation that is no longer trivial in this case is the temperature equation (5.10). Its convection and diffusion terms keep the same form as in the 3D case without becoming trivial. The major difference with the 3D case is that the velocity is now constant.

Simulation set-up

Physical parameters To obtain similar conditions as in the previous 3D analysis, the same physical parameters (λ , c_p and ρ) as presented in Tab. 5.1 are used. The simulation is carried out with the same length in the velocity direction, $L_{tot} = 0.02\text{m}$ and the same void fraction $\alpha = 6\%$; to satisfy those conditions in one dimension, we have: $L_{tot}\alpha = N_b D_b$. The number of bubbles and the bubbles' diameter still needs to be adjusted. The choice was to preserve the interfacial area, and so the number of bubbles in the 1D simulation is set to $N_b = 4$, then leading to $D_b = 3 \times 10^{-4}\text{m}$. The velocity is chosen to be identical to the relative velocity of the three-dimensional homogeneous bubbly flow, $v = 0.2\text{m/s}$.

Numerical parameters The number of cells in the length of the simulation is chosen to be as in 3D *i.e.*, $n_{tot} = 512$ and $\Delta x = 3.91 \times 10^{-5}\text{m}$ and the non-

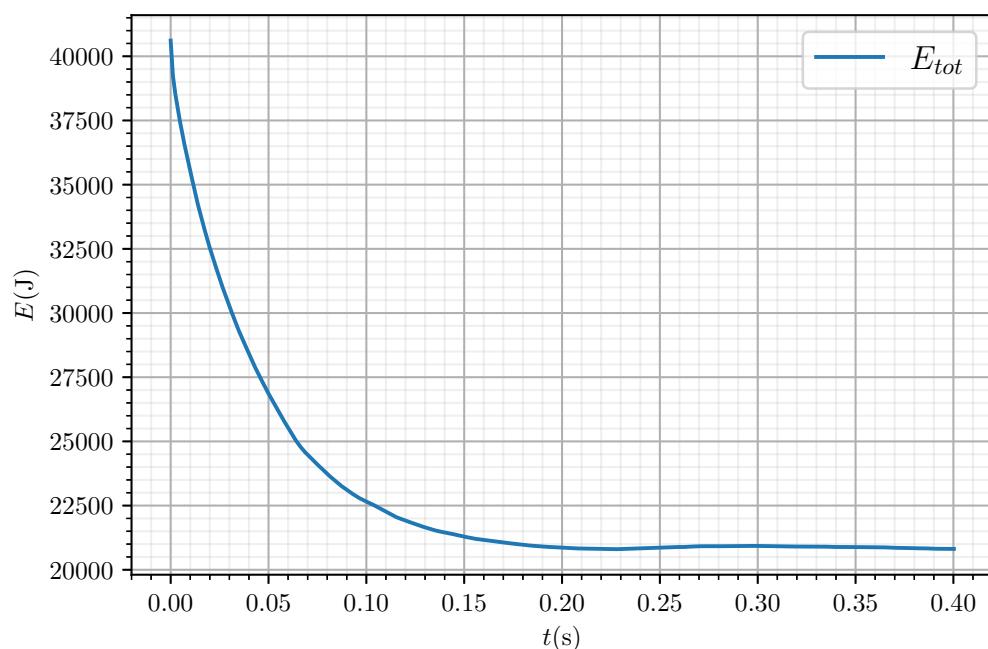


Figure 5.5 – Energy loss in the homogeneous bubbly flow as a function of time. The simulation uses a RK3 time scheme and a QUICK interpolation.

dimensional numbers for numerical convergence (the Fourier number Fo and the Courant number CFL) are imposed by the same constraints as in 3D simulations (see Tab. 5.4).

n_{tot}	Δx (m)	L_{tot} (m)	α	a_I (m^{-1})	N_b	D_b (m)	v ($m s^{-1}$)
512	$3,91 \times 10^{-5}$	0.02	6%	358	4	3×10^{-4}	0.2

Table 5.4 – Numerical values used in the 1D simulation aimed to reproduce the energy loss observed in a 3D homogeneous bubbly flow.

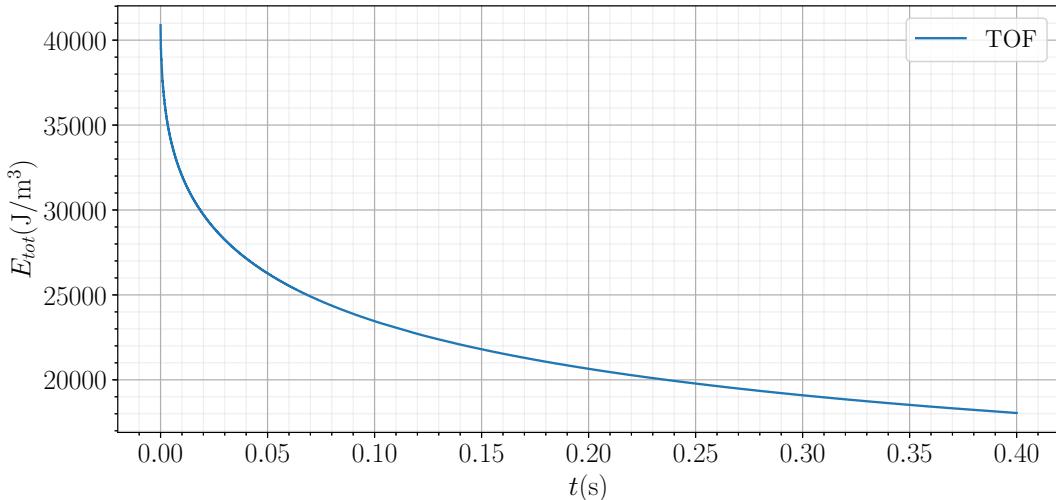


Figure 5.6 – Energy loss as a function of time in the equivalent 1D configuration. The simulation uses a RK3 time scheme and QUICK interpolation, as the 3D simulation.

Analysis of temperature profiles

As the simulation is one dimensional, the velocity is constant. It is therefore possible to obtain a solution for the diffusion-convection problem simply by translation of the solution of the diffusion problem. This translation is $x = y - vt$. Then a reference solution (termed as semi-analytical, or Ref on the figures) can be obtained by translation of the solution of the pure diffusion problem on a very fine grid (twice finer, with $\Delta x = 2,00 \times 10^{-5}$ m). Without convection, the simulation

using harmonic means of properties is almost conservative in energy, as observed in Sec. 5.1.8. We use this methodology to provide reference solutions for convection and convection/diffusion problems. In practice, we translate the solution of the pure diffusion problem by a distance $-v\Delta t$ for the graphical comparison of the curves. As one can see on Fig. 5.7, the TOF method leads to an under-evaluation

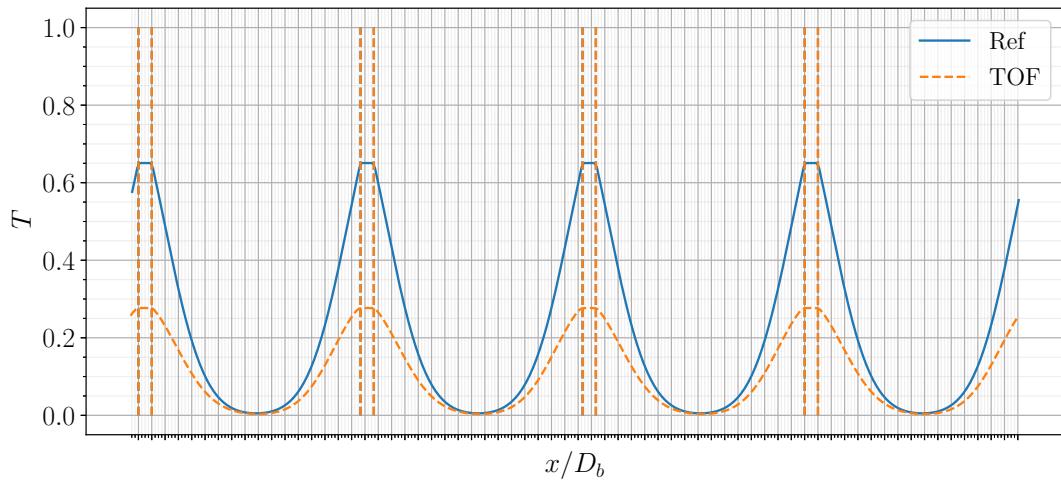


Figure 5.7 – Temperature profile at $t = 0.4\text{s}$ for the 1D simulation compared to the semi-analytical reference. The simulation uses a RK3 time scheme and QUICK interpolation, as the 3D simulation.

of the bubbles' temperature, which leads to a large energy loss (see Fig. 5.6). A loss of energy in this simulation is observed as in the three-dimensional case presented in Sec. 5.2. It encourages us in considering the test case of Sec. 5.2.2 as a simple but meaningful test case for three-dimensional simulations. Thus, this test case is used to evaluate new formulations using FluidDyn solver.

In all the following, 1D simulations are performed with the same parameters as presented in Sec. 5.2.2, except for the number of bubbles which is chosen to be one in order to increase the resolution without increasing the computational cost. Thus, α , L_{tot} and n_{tot} are kept the same, but a_I and D_b change, leading to a decreasing energy loss over the same time (the exchange surface diminishes) and an increased resolution (the number of cells per bubble diameter increases from around 8 to 30).

Convective schemes

This study is carried out to validate the impact of using a QUICK scheme rather than a WENO scheme. The set-up is identical to Sec. 5.2.2 with $D_b = 1,20 \times 10^{-3}\text{m}$.

The superposition of the results on the finer meshes for the three interpolation methods can be seen on Fig. 5.9. As expected, the WENO scheme gives the best results, the upwind scheme is far too diffusive compared to the other two, and the QUICK is not too diffusive. Its potential oscillatory behaviour is compensated by the diffusion. As the energy loss is almost the same using WENO or QUICK (see Fig. 5.8), it shows that the energy is not lost only due to the lesser capability of the QUICK scheme. Moreover the temperature profileis almost identical with both schemes (see Fig. 5.9); hence the QUICK scheme is satisfactory in those conditions and with the mesh refinement considered. This leads to the conclusion that the enhancements that have to be made to attain greater energy conservation are mainly not a matter of interpolation.

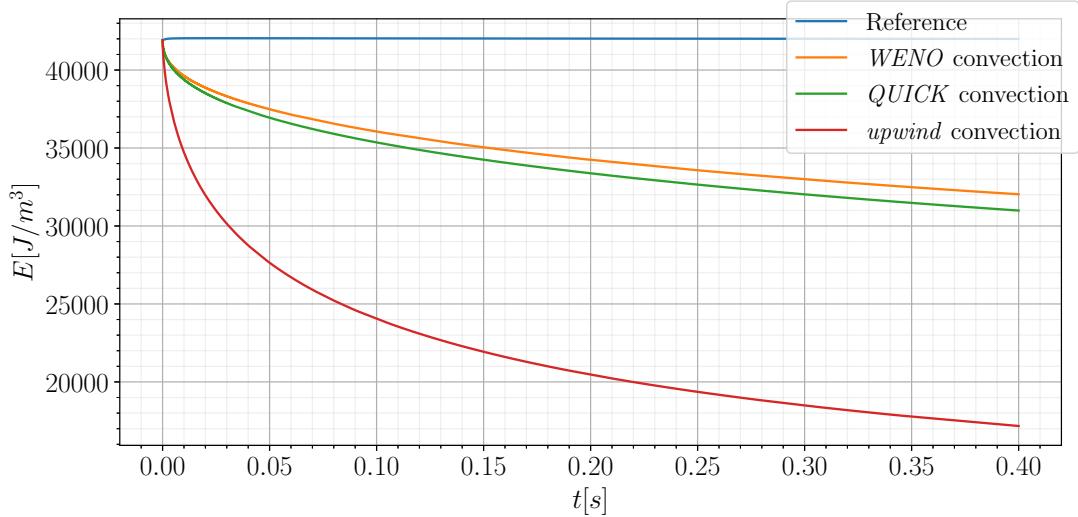


Figure 5.8 – Comparison of the different convection schemes: effects on the energy.

Mesh convergence for a convection-diffusion simulation

The mesh convergence observed in Fig. 5.10 has a coefficient of approximately -0.38 . This gives us a rough idea of the number of cells per diameter the mesh will need in order for the energy loss to be lower than 5% using a logarithmic regression. As an example, on this short simulation time, the mesh requirement would be $D_b/\Delta x > 700$, which is approximately 30 times the number of cells per diameter

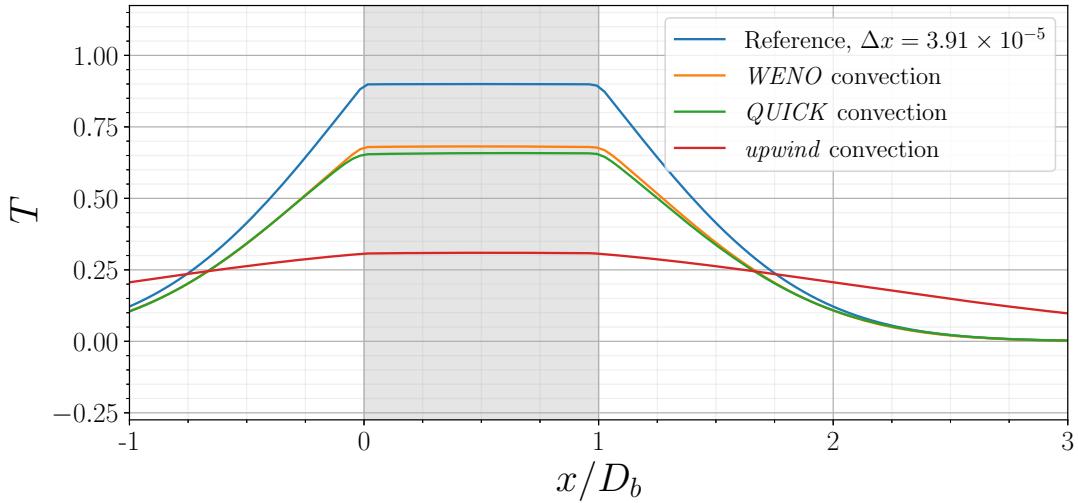
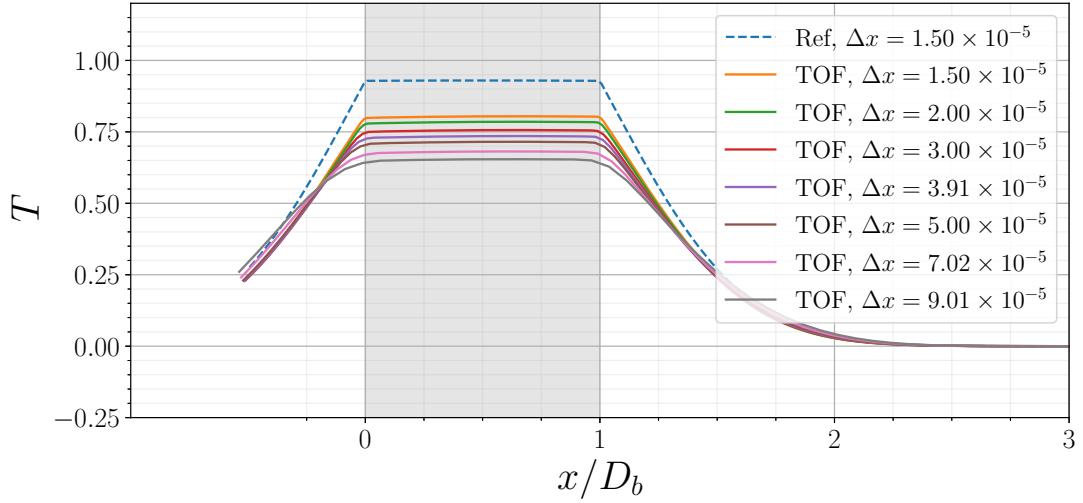


Figure 5.9 – Comparison of the different convection schemes after a simulation time of 0.4s using an Euler time scheme.

originally used in the 3D simulation; in three dimensions, the number of cells should then be multiplied by 27000. Moreover, considering that in this simulation the interfacial area is four times less than in the 3D simulation presented, reaching 5% of energy loss would be even harder in the 3D homogeneous bubbly flow. Finally, it should be noted that the mesh chosen for the 3D simulation gives a result almost converged for the corresponding dynamic simulation (see [20]). Consequently, a mesh convergence on the full three-dimensional simulation is not a satisfactory solution to tackle the energy conservation issue.

In summary, the new formulation based on the one-fluid temperature proposed in Sec. 5.1.7 relies on harmonic means of heat capacity and conductivity. However, even though this change gives good results in a pure diffusion case, it fails to eliminate the large energy loss observed in a convection-diffusion case. Moreover, only few improvements can be expected from the change of the interpolation method as observed in Sec. 5.2.2, and mesh convergence of the energy loss is really slow compared to an acceptable mesh refinement. The conservation issue is much more complex and has to be treated using a different formulation. In Sec. 5.3, new temperature and energy formulations are then introduced, different from that presented in Eq. (5.25) and used until now.



(a) Temperature profile for different meshes.

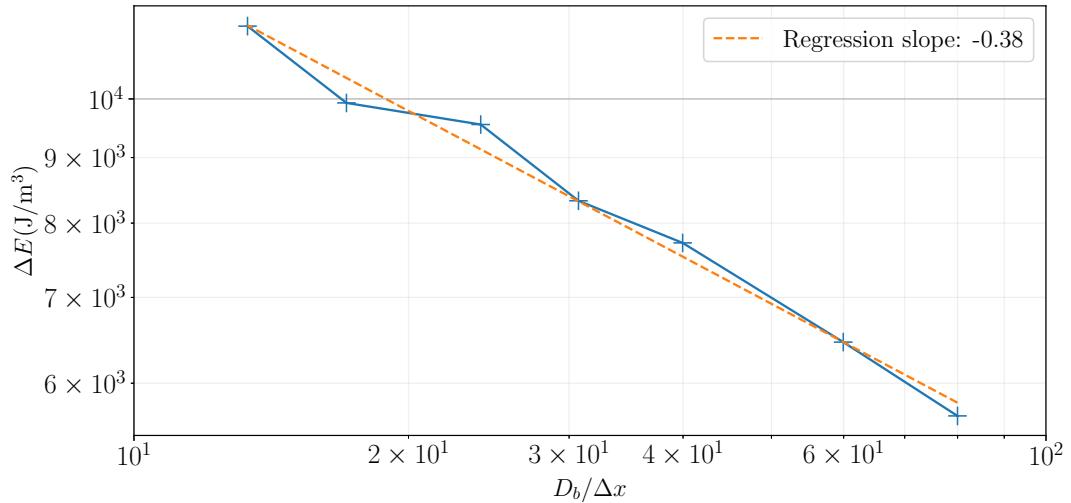
(b) Energy loss as a function of the mesh size Δx .

Figure 5.10 – Convergence of the simulation with convection and diffusion, with decreasing Δx and $t_{tot} = 0.1\text{s}$ and $\Delta t = 1,02 \times 10^{-6}\text{s}$, the Euler time scheme and a QUICK interpolation are used.

5.3 New formulations: quest for conservative and accurate formulations

In this section, new and original methods are presented in order to hold greater conservativeness. First, come two formulations starting with the temperature equation (Sec. 5.3.1 and 5.3.1). Then, two formulations using the energy equation (Sec. 5.3.2 and 5.3.2) are introduced. Those different formulations are summarized in Tab. 5.5. In those formulations, the values are discretized at different locations, notably at the cell centres, faces or at the interface in two-phase cells, see Fig. 5.11. Each formulation is implemented in FluidDyn [80]. They are expressed in this paper in a general three-dimensional framework, but some particularity of the one-dimensional case are used in the implementation, especially for the interfacial temperature and heat flux calculus, which is described in Sec 5.3.1.

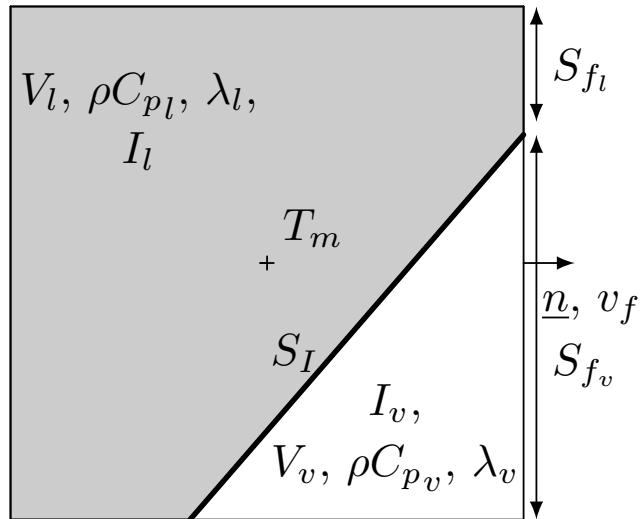


Figure 5.11 – Scheme of a cell illustrating the known values from which other values are interpolated.

5.3.1 Improvement of the temperature equation integration in the temperature formulation

The local one-fluid temperature equation used in this part is Eq. (5.11). In Sec. 5.1, the mean values over the cell of the discontinuous properties λ and ρc_p are used. Sec. 5.2.1 showed that the main drawback of this one-fluid approach (TOF) is that the evolution of the fluxes is inaccurate and the total energy is not

Table 5.5 – Panel of methods used. In this table f refers to an arbitrary interpolation function, and thus $f(Y)$ is an interpolation using Y values taken from several cells. TOF: temperature one-fluid, EOFm: energy one-fluid modified, TSP: temperature with single-phase fluxes, ESP: energy with single-phase fluxes, TSV: temperature separated volume integral.

	Temperature	Energy
One-fluid	TOF, Eq. (5.26). Interp.: $T_f = f(T_m)$, $q_f = \lambda_f \nabla_f T$, with $\lambda_f = f(\lambda_h)$ and $\nabla_f T = f(T_m)$. Hyp. (5.17): diffusion divided by ρc_{ph} .	EOFm, Eq. (5.43). Interp.: $h_f = f(h_m)$, $q_f = \lambda_f \nabla_f T$, with $\lambda_f = f(\lambda_h)$ and $\nabla_f T = f(T_m)$. Hyp. (5.38): $h_m = \rho c_{ph} \times T_m$.
Single-phase	TSP, Eq. (5.31). Interp.: $T_f = f(T_k, T_I)$, $q_f = f(\lambda_k, T_k, q_I)$ with $T_I = f(\lambda_k, T_k)$ and $q_I = f(\lambda_k, T_k)$. Hyp. (5.17): diffusion divided by ρc_{ph} .	ESP, Eq. (5.49). Interp.: $T_f = f(T_k, T_I)$, $q_f = f(\lambda_f, T_k, q_I)$ with $T_I = f(\lambda_k, T_k)$ and $q_I = f(\lambda_k, T_k)$. Hyp. (5.45), T_f and v_f constant over a whole face during a time step.
Separated volumes (Additional interfacial terms)	TSV, Eq. (5.35). Interp.: Same as TSP. Hyp. (5.34), q constant over a whole face/interface during a time step.	Identical to ESV.

naturally conserved in the presence of convection. This section presents alternative methods in order to improve the integration of the temperature equation (5.11). There are two possibilities to improve the conservativeness of the temperature formulation:

- either keeping the formulation presented in Sec. 5.1, but calculating the fluxes with an interpolation of single-phase and interfacial values at the faces as shown in Fig. 5.12,
- or by separating the volume integral over both phases and using the discontinuous properties of each phase and interfacial fluxes.

Both methods need the calculation of interfacial values to make single-phase interpolations (interpolation without using values at mixed cells), which is presented immediately in Sec. 5.3.1.

Temperature and heat flux reconstruction at the interface with a finite difference approach in one dimension

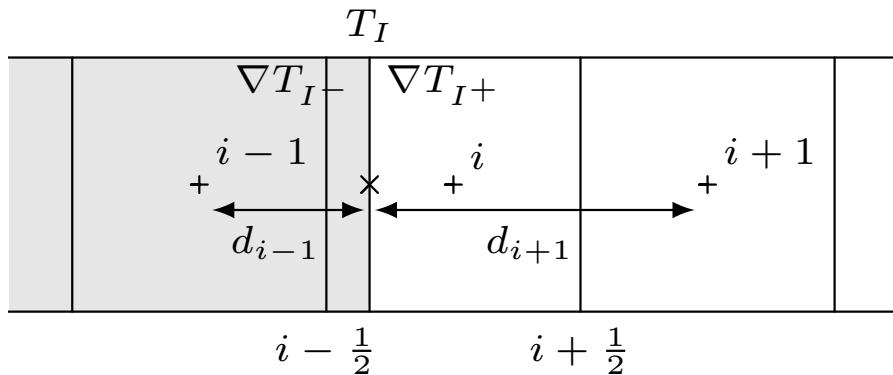


Figure 5.12 – Interpolation scheme for the temperature and the heat flux at the interface.

The temperature reconstruction is done using the continuity of the temperature (Eq (5.7)) and of the normal heat flux (Eq (5.8)) at the interface along with the Taylor series of the temperature in each phase k :

$$T_k(x) = T_I + \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial^i T}{\partial x^i} \right|_{I_k} \frac{(x - x_I)^i}{i!} + \mathcal{O}((x - x_I)^n) \quad (5.28)$$

$\partial^i T / \partial x^i|_{I_k}$ is the i^{th} derivative of the temperature evaluated at the interface in the phase k (it is discontinuous across the interface for $i = 1$). By evaluating the expression in adjacent single-phase cells, we obtain the following first-order

reconstruction

$$\begin{cases} T_{i-1} = T_I - \nabla T_{I^-} d_{i-1} \\ T_{i+1} = T_I + \nabla T_{I^+} d_{i+1} \\ \lambda_{I^-} \nabla T_{I^-} = \lambda_{I^+} \nabla T_{I^+} \end{cases} \quad (5.29)$$

with d_i the distance between the centre of the cell i and the interface, and ∇T_{I^\pm} the space derivative of the temperature immediately before or after the interface. The equation system (5.29) can never be stiff because the distances d_{i-1} and d_{i+1} are greater than $\Delta x/2$. One can note that the temperature T_i in the mixed element is not used at all in this reconstruction. The resolution of this system is used to deduce T_I , ∇T_{I^-} and ∇T_{I^+} .

Temperature with Single-Phase fluxes (TSP)

The main idea in this section is to compute single-phase fluxes *i.e.*, fluxes interpolated from phase or interfacial values only, but not from values of the other phase nor mean values on mixed cells. Then, the formulation used is still that presented in Eq. (5.20), but the fluxes interpolations are changed in the following ways:

Temperature interpolation at the faces T_f In 1D, a face is always pure thus it can be associated to a given phase. In this method, T_f is an interpolation of T_m of single-phase cells (with the same phase as the face) and of the interfacial temperature T_I . The interpolation used for the temperature is a third order upwind interpolation, using $q_I = \lambda \nabla T|_I \cdot \underline{n}_I$ if needed (on the face $i+1/2$). The values used are represented on Fig. 5.13. Here are the interpolations used near the interface assuming the velocity is positive from left to right:

- for $i-3/2$ and $i-1/2$, a linear third order upwind scheme is used, with a 3 points stencil, using the temperature and position of the interface instead of the temperature of the two-phase cell i if needed.
- on $i+1/2$, a linear third order upwind scheme is used, using the interfacial temperature instead of the temperature of the mixed cell i , the mean temperature of the cell $i+1$, and the interface flux q_I .
- for $i+3/2$ and $i+5/2$, a linear third order upwind scheme is used, with a 3 points stencil similar to the first case, using the temperature and position of the interface instead of the temperature of the two-phase cell i if needed.

In those interpolations, the spacing between points is non-uniform due to the moving position of the interface. Besides, at face $i+1/2$, the interpolation is based on two temperatures and a gradient instead of 3 temperatures.

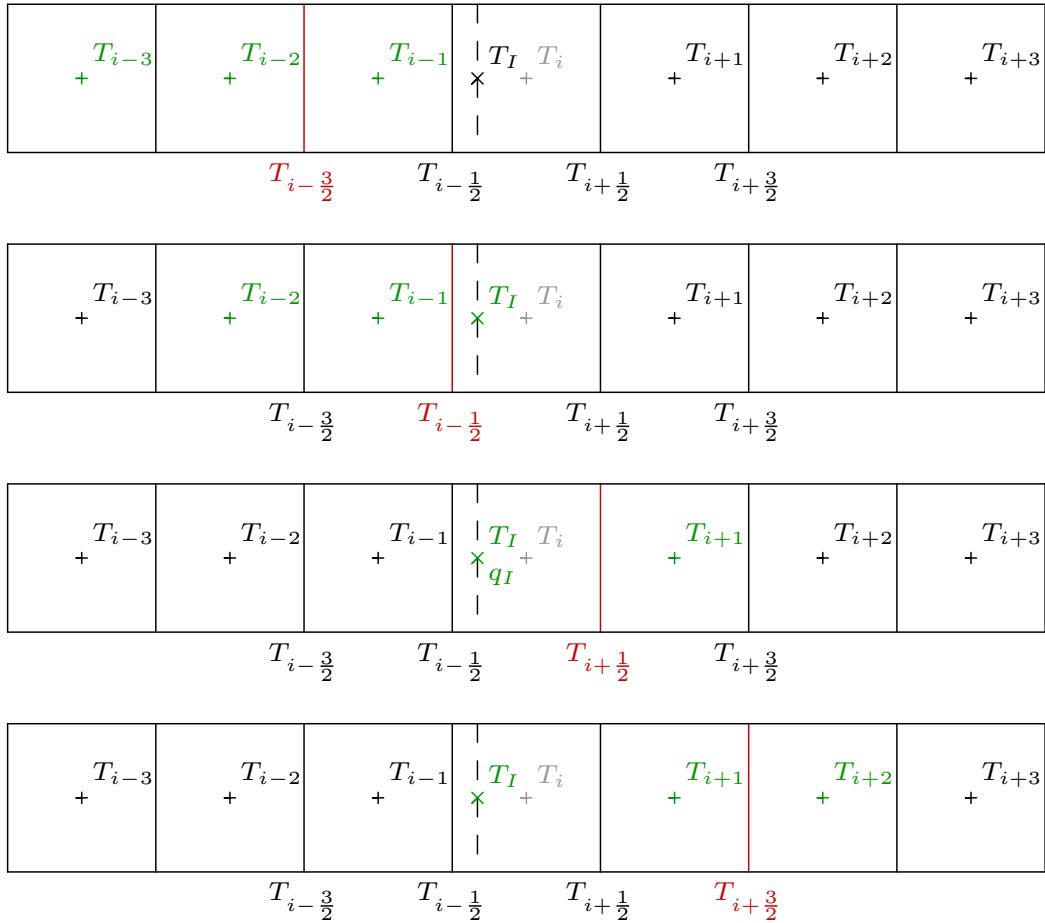


Figure 5.13 – Values used for the interpolation of the temperature near the interface in one dimension with the fluid velocity positive from left to right. The green values are used to interpolate the red values.

Heat flux q_f discretization at the faces The discretization used is a second order centred linear interpolation when the cells are single-phase. On the particular faces $i-1/2$ and $i+1/2$, T_I and q_I are used with the pure values of the temperatures at $i \pm 1$ and $i \pm 2$ in a third order “centred” interpolation (the same number of values is used from each part of the face, but they are not necessarily evenly spaced).

Heat mass capacity ρc_{ph} time integration The integral over time of $1/\rho c_{ph}$ is calculated using a Crank-Nicolson second order centred time scheme:

$$\int_{\Delta t} \frac{1}{\rho c_{ph}} dt \approx \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{1}{\rho c_{ph}^{(n+1)}} + \frac{1}{\rho c_{ph}^{(n)}} \right) \quad (5.30)$$

This change brings more precision when the jump $1/\rho c_{pl} - 1/\rho c_{pv}$ is large, but it is not mandatory. Simulations were made without this improved time scheme in FluidDyn and the results were not very different for the chosen parameters. Using all those discretizations, the following equation is obtained:

$$T_m^{(n+1)} - T_m^{(n)} = \frac{\Delta t}{V_{cell}} \left(- \sum_f T_f^{(n)} v_f^{(n)} S_f + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho c_{ph}^{(n+1)}} + \frac{1}{\rho c_{ph}^{(n)}} \right) \sum_f q_f^{(n)} S_f \right) \quad (5.31)$$

Temperature with Separation of the Volume integral over both phases (TSV)

This section presents a method based on the decomposition of the volume integral over each phase separately. A similar method was also introduced very recently by Zhao, Zhang, and Ni [103] in the context of simulations of boiling flows. The concept is to write conservative equations over both sub-volumes of each phase. Splitting the volume integral, Eq. (5.20) becomes

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = \frac{1}{V_{cell}} \left(- \oint_{S_{cell}} T_f \underline{v}_f \cdot \underline{n} dS + \frac{1}{\rho c_{pl}} \oint_{S_{cell,l}} \lambda_l \nabla T_l \cdot \underline{n} dS + \frac{1}{\rho c_{pv}} \oint_{S_{cell,v}} \lambda_v \nabla T_v \cdot \underline{n} dS \right) \quad (5.32)$$

$$= \frac{1}{V_{cell}} \left(- \oint_{S_{cell}} T_f \underline{v}_f \cdot \underline{n} dS + \oint_{S_{cell}} \frac{\lambda}{\rho c_p} \nabla T \cdot \underline{n} dS + \left(\frac{1}{\rho c_{pl}} - \frac{1}{\rho c_{pv}} \right) \int_{S_{cell,I}} \lambda \nabla T_I \cdot \underline{n}_I dS \right) \quad (5.33)$$

using the interfacial flux equality Eq. (5.8). As $1/\rho c_p$ is not continuous over a face during a time step when the interface pass through the face, but $\lambda \nabla T$ is, the

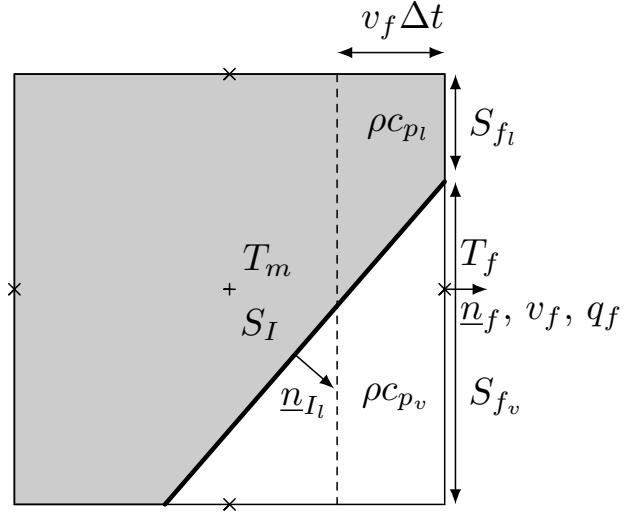


Figure 5.14 – Scheme of a cell illustrating the volume tracking of each phase in a conservative approach.

following approximations are made:

$$\begin{aligned} \int_{\Delta t} \left(\int_{S_f} \frac{\lambda}{\rho c_p} \nabla T \cdot \underline{n} dS \right) dt &\approx q_f^{(n)} \left(\sum_k \frac{1}{\rho c_{p_k}} \int_{\Delta t} S_{f_k}(t) dt \right) \\ \int_{\Delta t} \left(\int_{S_I} \lambda \nabla T \cdot \underline{n}_{I_l} dS \right) dt &\approx q_{I_l}^{(n)} \int_{\Delta t} S_I dt \end{aligned} \quad (5.34)$$

The different terms, and especially the part of the surface S_{f_k} wetted by phase k , are defined on Fig. 5.14. Here, the face values of temperature T_f and heat transfer q_f are computed in the same way as in Sec. 5.3.1. q_{I_l} is the normal interfacial heat flux going from the liquid to the gas. After time integration, discretization and using Eq. (5.34) it gives:

$$\begin{aligned} T_m^{(n+1)} - T_m^{(n)} &= -\frac{\Delta t}{V_{cell}} \sum_f T_f^{(n)} v_f^{(n)} S_f + \frac{1}{V_{cell}} \sum_f \left(\sum_k \frac{1}{\rho c_{p_k}} \int_{\Delta t} S_{f_k}(t) dt \right) q_f^{(n)} \\ &\quad + \frac{1}{V_{cell}} \left(\frac{1}{\rho c_{p_l}} - \frac{1}{\rho c_{p_v}} \right) q_{I_l}^{(n)} \int_{\Delta t} S_I dt \end{aligned} \quad (5.35)$$

Comparison of the temperature formulations (TOF, TSP, TSV)

As one can see on Fig. 5.15, none of those new formulations is purely conservative, but both new formulations hold better conservation properties. The default of the TSP method is that it gains energy and the temperature is no longer symmetric as it should be (see Fig. 5.16). TSP only gains half as much energy as the TOF method loses; moreover, the TSV method gains energy too, but less than the TSP formulation. The advantages of those methods lay in the fact that they still use a temperature point of view. But obviously, their conservation is not sufficient given the highly difficult conditions (large ρc_p and λ jumps) used in this study. In both cases as one can see in Fig. 5.16, the diffusion profile is not symmetrical with respect to the bubble centre at $x = 0.5D_b$ as it should be. The temperature gradient inside the bubble is almost constant. The peaks observed at the interface of the bubble comes from a flux jump across the interface that should not be observed, thus showing that the diffusion flux is miscalculated at the interface. Hence, the new methods are more conservative but they produce temperature profiles less satisfactory than the TOF method.

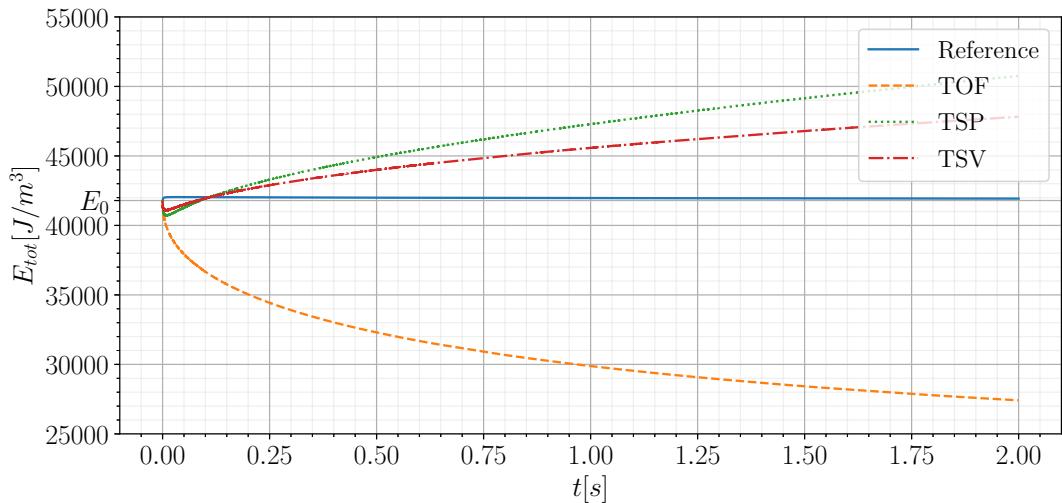


Figure 5.15 – Energy evolution with different temperature formulations.

5.3.2 Energy formulation

Even if the improvements proposed in Sec. 5.3.1 are significant, none of those formulations is genuinely conservative. In order to get a conservative formulation of the temperature equation, the most natural way is to write the local equation in

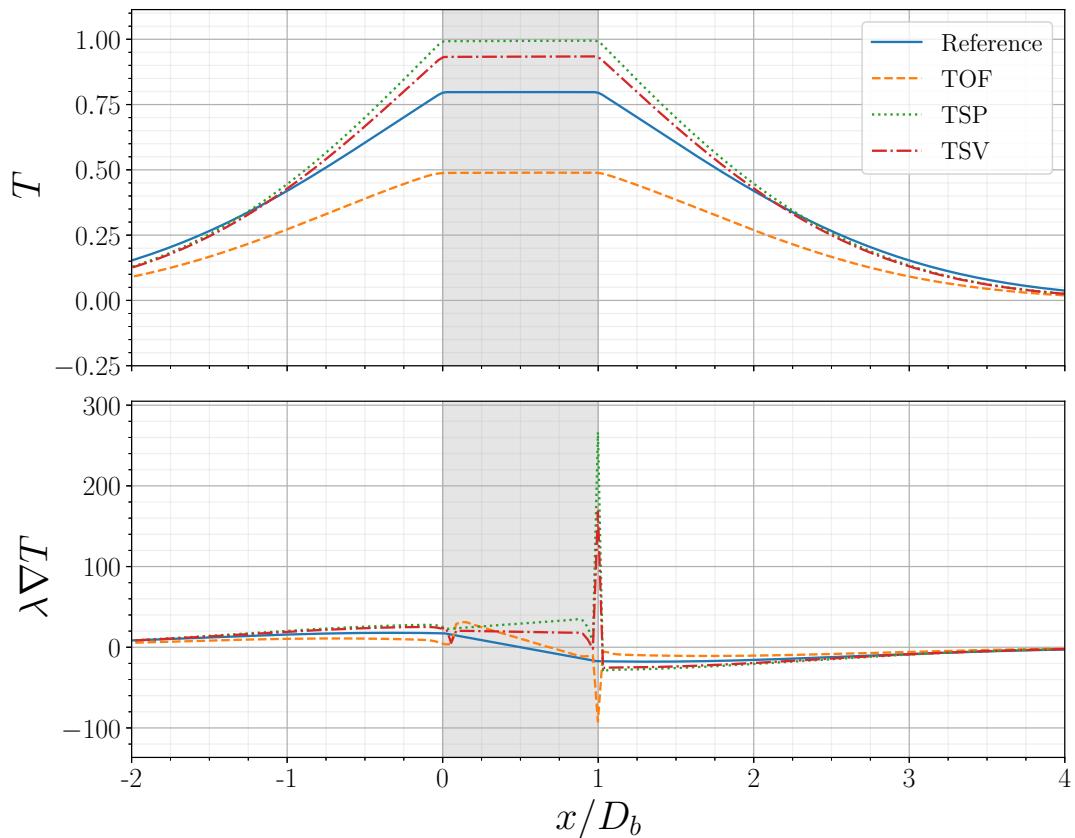


Figure 5.16 – Final temperature and diffusion flux (at $t = 2s$) with different temperature formulations. The fluid goes from left to right and the domain is actually much larger. An Euler time scheme and a QUICK interpolation (except at the interface vicinity) are used.

energy. In this section, this local equation derived from the phase local equations, the jump conditions (Eqs. (5.8), (5.7) and (5.9)) and the one-fluid conventions (Eq. (5.10)), is used:

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho c_p T \underline{v}) + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (5.36)$$

Energy One-Fluid formulation (EOF and EOFm)

After space integration, equation (5.36) becomes:

$$\frac{\partial \int_{V_{cell}} \rho c_p T dV}{\partial t} = - \oint_{S_{cell}} \rho c_p T \underline{v} \cdot \underline{n} dS + \oint_{S_{cell}} \lambda \nabla T \cdot \underline{n} dS \quad (5.37)$$

To discretize it, two new problems arise: one for the computation of ∇T and the other for the computation of $\rho c_p T$ at the faces. On the one hand, assessing the gradient ∇T at the faces requires an expression to build the temperature at the cell centres; this issue is addressed using Eq. (5.38). On the other hand, the interpolation of $\rho c_p T$ to the face is not straightforward because of the discontinuity of ρc_p which in practice makes a linear interpolation very inaccurate and impractical. For these two reasons (flux assessment and non-linear interpolation of the discontinuous $\rho c_p T$), we want to keep the cell temperature T_m and the cell mass heat capacity ρc_{p_a} as separate variables instead of using a cell enthalpy defined as $h_m = \int_{V_{cell}} \rho c_p T dV$. Then, the following approximation is used and it is exact when the cell is single-phase:

$$h_m \approx \frac{1}{V_{cell}} \int_{V_{cell}} T dV \times \frac{1}{V_{cell}} \int_{V_{cell}} \rho c_p dV = \rho c_{p_a} \times T_m \quad (5.38)$$

With this hypothesis, a straightforward method can be written to discretize the energy equation (5.37):

$$\begin{aligned} \rho c_p^{(n+1)} T_m^{(n+1)} - \rho c_p^{(n)} T_m^{(n)} &= \\ - \frac{\Delta t}{V_{cell}} \sum_f (\rho c_{p_a}^{(n)} T_m^{(n)})_f v_f^{(n)} S_f + \frac{\Delta t}{V_{cell}} \sum_f \lambda_{hf}^{(n)} \nabla_f T^{(n)} S_f & \end{aligned} \quad (5.39)$$

However, as Eq. (5.38) is no longer valid for cells crossed by the interface, this formulation leads to numerical instabilities. Precautions have to be taken to ensure the convergence of the scheme using the cell temperature T_m . A way to take care of the instabilities that occur in the straightforward EOF method is to use a modified EOF method (EOFm) inspired by a method presented by Boniou, Schmitt, and Vié [12] for the density and momentum. A convection equation of ρc_p is written

as follows

$$\rho c_{p_a}^* - \rho c_{p_a}^{(n)} = -\frac{1}{V_{cell}} \int_{\Delta t} \oint_{S_{cell}} \rho c_p \underline{v} \cdot \underline{n} dS dt \quad (5.40)$$

where $\rho c_{p_a}^*$ is a temporary variable for the time advancement of the heat mass capacity. For simplicity $\rho c_{p_a}^*$ is written as an explicit Euler evolution of ρc_p , but it is possible to do this evolution using a Runge-Kutta scheme if the rest of the numerical scheme is also Runge-Kutta. This $\rho c_{p_a}^*$ is obtained consistently with T_m during a convection step:

$$\rho c_{p_a}^* T_m^{(n+1)} - \rho c_{p_a}^{(n)} T_m^{(n)} = \frac{1}{V_{cell}} \int_{\Delta t} \left(- \oint_{S_{cell}} \rho c_p T \underline{v} \cdot \underline{n} dS + \oint_{S_{cell}} \lambda \nabla T \cdot \underline{n} dS \right) dt \quad (5.41)$$

Manipulating equation (5.41) to explicitly introduce the time increment of temperature and using equation (5.40) leads to:

$$\begin{aligned} \rho c_{p_a}^* (T_m^{(n+1)} - T_m^{(n)}) &= \frac{1}{V_{cell}} \int_{\Delta t} \left(-T_m^{(n)} \oint_{S_{cell}} \rho c_p \underline{v} \cdot \underline{n} dS - \oint_{S_{cell}} \rho c_p T \underline{v} \cdot \underline{n} dS \right. \\ &\quad \left. + \oint_{S_{cell}} \lambda \nabla T \cdot \underline{n} dS \right) dt \end{aligned} \quad (5.42)$$

The convective flux of $\rho c_p T$ is interpolated at the faces from the value at the cell centre of $\rho c_{p_a} T_m$. The convective flux of ρc_p at the faces in Eq. (5.40) is calculated using the same interpolation scheme to ensure accuracy. It is an essential precaution to use the same scheme for both interpolations to guarantee the coherency of both fluxes. Besides, the diffusive flux is defined as the product of λ_{h_f} and $\nabla_f T$. It is easy now to calculate $\nabla_f T$ as a function of T_m as the cell temperature is chosen as a main variable of the problem even in this energy formulation. Finally, after time integration and an Euler explicit discretization, Eq. (5.43) is obtained:

$$\begin{aligned} \rho c_{p_a}^* \frac{T_m^{(n+1)} - T_m^{(n)}}{\Delta t} &= -\frac{1}{V_{cell}} T_m^{(n)} \sum_f \rho c_{p_a f}^{(n)} v_f^{(n)} S_f - \frac{1}{V_{cell}} \sum_f (\rho c_{p_a}^{(n)} T_m^{(n)})_f v_f^{(n)} S_f \\ &\quad + \frac{1}{V_{cell}} \sum_f \lambda_{h_f}^{(n)} \nabla_f T^{(n)} S_f \end{aligned} \quad (5.43)$$

Face interpolations are made using the following schemes:

- the face energy $(\rho c_{p_a} T_m)_f$ and mass capacity $\rho c_{p_a f}$ are interpolated with a QUICK scheme from $\rho c_{p_a} T_m$ and ρc_{p_a} , and as stated in [12], an upwind interpolation is used when the interface crosses the QUICK stencil;
- the thermal conductivity λ_{h_f} is interpolated with a harmonic second-order

- scheme from λ_h as in Eq. (5.23);
- the temperature gradient $\nabla_f T$ is computed with a second-order central difference scheme from T_m as in Eq. (5.22).

It should be noted that ρc_p^* is an intermediate variable. It is forgotten at the end of the time step as ρc_p^{n+1} is recomputed from the front position and from the colour function I^{n+1} , in the classical way used for any other physical property. This replacement of ρc_p^* by ρc_p^{n+1} is responsible for the loss of the energy conservation property of the numerical scheme, which was ensured by the formulation (5.37). But in this formulation, it is inevitable due to the fact that keeping ρc_p^* diffuses this property, and not going through this intermediate leads to a numerical instability. The hypothesis which seems the most flawed is that of the continuity of $\rho c_p T \underline{v}$. Therefore, it is necessary to compute the fluxes (especially the convective one) to the faces more accurately.

Energy with Single-Phase fluxes (ESP)

The first and highest order error lies in the values of the physical characteristics at the interfaces. In 1D, it seems obvious that the physical properties at a face are single-phase and not weighted by a phase indicator function. Actually, a problem arises when the interface passes through a face during the time step. Indeed, this problem appears clearly if one considers only convection. If we use a pure ρc_p while it changes during the time step, an important error on the energy transfer through this face occurs. This error comes from the inequality (for an explicit Euler integration):

$$\int_{\Delta t} \oint_{S_{cell}} \rho c_p T \underline{v} \cdot \underline{n} dS dt \neq \Delta t \sum_f \rho c_p^{(n)} T_f^{(n)} v_f^{(n)} S_f \quad (5.44)$$

As the temperature is continuous, we can imagine a case where the temperature is constant everywhere and the interface was immediately upstream of the face at step n . In this case, we have a maximum error on this time step which is $(\rho_l c_{pl} - \rho_v c_{pv}) T v S_{cell} \Delta t$. When integrated in time and space, this error is large even though it is located only at the interface. It is thus necessary to correct this error by better estimating the integral $\int_{\Delta t} \oint_{S_{cell}} \rho c_p T \underline{v} \cdot \underline{n} dS dt$. To improve this estimation, the effect of the temperature's variation on a face and on a single time step is neglected compared to the variation of the thermal mass capacity. Then,

the integral on a face S_{cell_f} is calculated in the following way

$$\int_{\Delta t} \int_{S_{cell_f}} \rho c_p T \underline{v} \cdot \underline{n} dS dt \approx \int_{\Delta t} \int_{S_{cell_f}} \rho c_p dS dt \times T_f^{(n)} v_f^{(n)} \quad (5.45)$$

$$= \int_{\Delta t} \left(\sum_k \rho c_{p_k} S_{f_k}(t) \right) dt \times T_f^{(n)} v_f^{(n)} \quad (5.46)$$

with $v_f = \underline{v} \cdot \underline{n}$. In the particular case where the simulation is one-dimensional, this integration can be easily calculated as:

$$\int_{\Delta t} \left(\sum_k \rho c_{p_k} S_{f_k}(t) \right) dt = S_f \sum_k \rho c_{p_k} \int_{\Delta t} \chi_k(t) dt \quad (5.47)$$

because χ_k is either zero or one on the whole face, and its time evolution is known. Thus, the time integration of the wetted surface $S_{f_k}(t)$ is straightforward in this case.

The same time/phase integration is not made on λ because the product $\lambda \nabla T$ is continuous. Then, $\lambda \nabla T$ is directly estimated from $\lambda \nabla T_I$ and the neighbouring single-phase values. Interpolations of interfacial values are described in Sec. 5.3.1. Now that the discontinuous terms have been integrated by phase, the use of ρc_p^* is no longer needed to maintain stability. And so this time the formulation is genuinely conservative. It can directly be written as

$$\rho c_{p_a}^{(n+1)} T_m^{(n+1)} - \rho c_{p_a}^{(n)} T_m^{(n)} = \frac{1}{V_{cell}} \int_{\Delta t} \left(- \oint_{S_{cell}} \rho c_p T \underline{v} \cdot \underline{n} dS + \oint_{S_{cell}} \lambda \nabla T \cdot \underline{n} dS \right) dt \quad (5.48)$$

and after discretization it gives:

$$\begin{aligned} \rho c_{p_a}^{(n+1)} T_m^{(n+1)} - \rho c_{p_a}^{(n)} T_m^{(n)} &= \\ \frac{\Delta t}{V_{cell}} \left(- \frac{1}{\Delta t} \sum_f \left(\sum_k \rho c_{p_k} \int_{\Delta t} S_{f_k}(t) dt \right) T_f^{(n)} v_f^{(n)} + \sum_f q_f^{(n)} S_f \right) \end{aligned} \quad (5.49)$$

The same reasoning as in the temperature formulation can be done in the separation of volumes, but it actually leads to the same equation (Eq. (5.49)). That is because no hypothesis on mean properties is made (such as in Eq. (5.17)), and as the energy is a conservative variable, its energy balance over a volume equals the sum of both balance over two sub-volumes. So the separation on each phase does not lead to a different formulation.

Comparison of the energy formulations (EOFm and ESP) to the standard temperature formulation (TOF)

In the energy paradigm, the main advantage lays in the inherent conservation properties of the formulation. The problem comes from the difficulty to recover the temperature gradient $\nabla_f T$ necessary to the diffusive term. Because of this difficulty, the formulation adapted for stability reasons (EOFm) uses a convected volume heat capacity, which thus is numerically diffused, and which is forgotten at the end of the time step. As a consequence, this method is no longer conservative. As one can see in Fig. 5.17, it leads to an augmentation of the global thermal energy in the simulation. This comes from the fact that the gas temperature is over-estimated and that this phase contains most of the energy (see Fig. 5.18), as the higher value of heat capacity is in the bubbles in our conditions. Moreover, the temperature gradient inside the bubble is clearly different from the reference one as it is almost always positive, which is non physical (it should be negative in the part between the centre of the bubble and $x/D_b = 1$, so that it is symmetrical). The change from ρc_p^* to $\rho c_p^{(n+1)}$ creates an energy increase in the mixed cell. On the contrary, the ESP method is purely conservative. This perfect conservation property comes from the finite volume method used with fluxes taken identically on a face shared by two cells. This does not mean that there are no errors in this scheme, the errors come from the fluxes estimations as classically encountered with any discretization method. However, one can see on Fig. 5.18 that the reconstructed temperature profile is very satisfactory and almost matches the reference temperature. The diffusive flux at the interfaces seems to be very slightly under-estimated compared to the reference one because the temperature is slightly greater than the reference in the bubble and slightly lower than the reference in the liquid far away from the bubble.

5.3.3 Convergence order of the ESP method

The order of convergence of the newly developed method (the ESP method) is compared to the convergence of the temperature one-fluid (TOF) method. The simulations use the same parameters than in Sec. 5.2.2, reported Tab. 5.1, but with only one bubble. The reference used to compute the L^2 error is the result of a computation with the TOF method, without convection. This reference is computed with $D_b/\Delta x = 170$. The error is evaluated after a simulation time of 0,10 s. This corresponds to the travel of a domain length by the bubble. As the meshes used might not coincide with the reference mesh, a linear interpolation of the reference temperature at the tested mesh is done. For the meshes assessed, the timestep of the simulation corresponds to the smallest timestep chosen to satisfy the numerical stability constraints ($\Delta t = 9,09 \times 10^{-7}$ s). Fig. 5.19 shows that

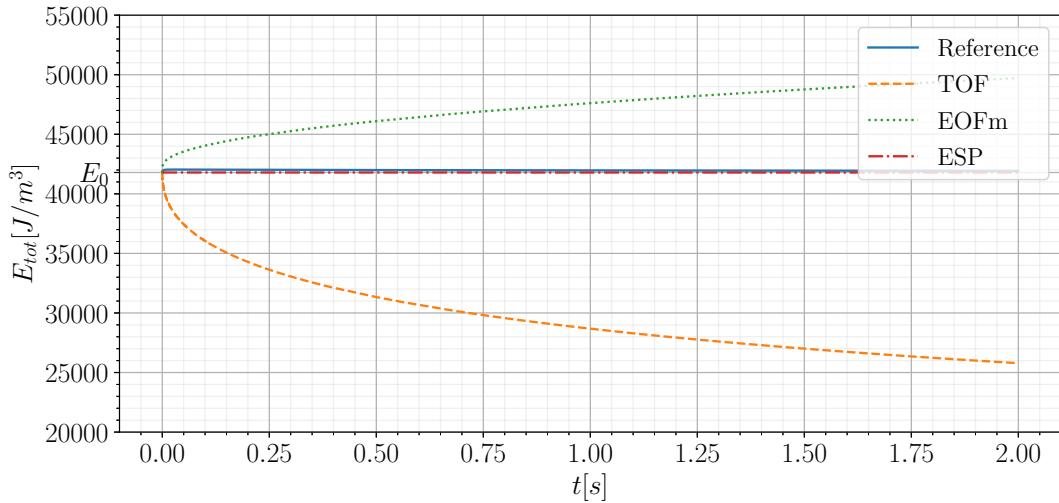


Figure 5.17 – Energy evolution with different energy formulations.

the proposed numerical formulation possesses both a higher order and a smaller initial error for the range of resolution considered. The poor order of the TOF method comes from the lack of conservation. The second order observed for the ESP method corresponds to the diffusion method order.

Conclusions

In this article, the energy conservation property of different numerical formulations was evaluated for the temperature equation without phase change in the finite volume/front-tracking framework. At first, the natural method considering the temperature as a one-fluid variable was improved (see Sec. 5.1.8) to tackle the interface condition issue that appears without this modification (see Figs. 5.3a and 5.3b) in a pure diffusion case. But this improved formulation still does not conserve the thermal energy in the fluid. An error of 50% is obtained. Several new and original formulations are proposed and tested to improve the energy conservation and the scheme accuracy. We show that as long as the equation is written as the time derivative of the temperature (and not the energy), it does not hold energy conservation in a full convection-diffusion simulation (see Sec. 5.2.1). With a temperature evolution equation, conservation is not attained because of the heat capacity discontinuity between the phases which prevents the possibility to write the equation in a conservative way (only with fluxes). On the contrary, an energy formulation is naturally conservative, provided that the temperature is calculated

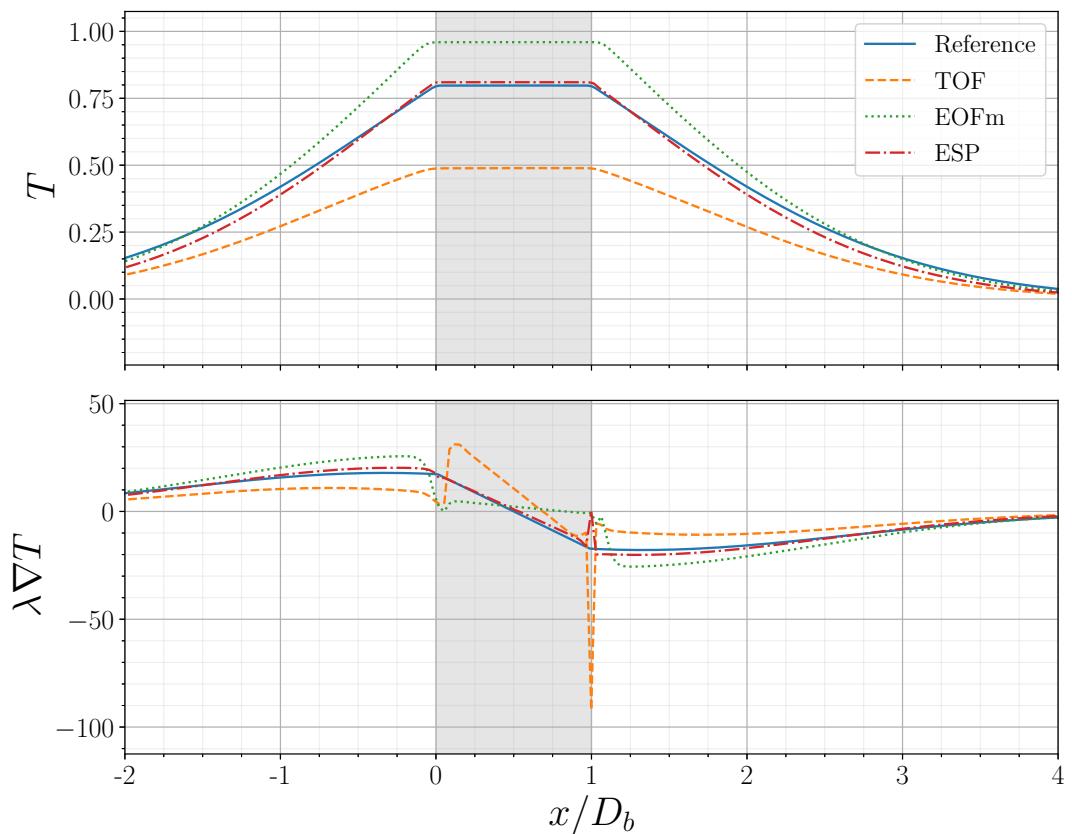


Figure 5.18 – Final temperature and diffusion flux (at $t = 2s$) with different energy formulations.

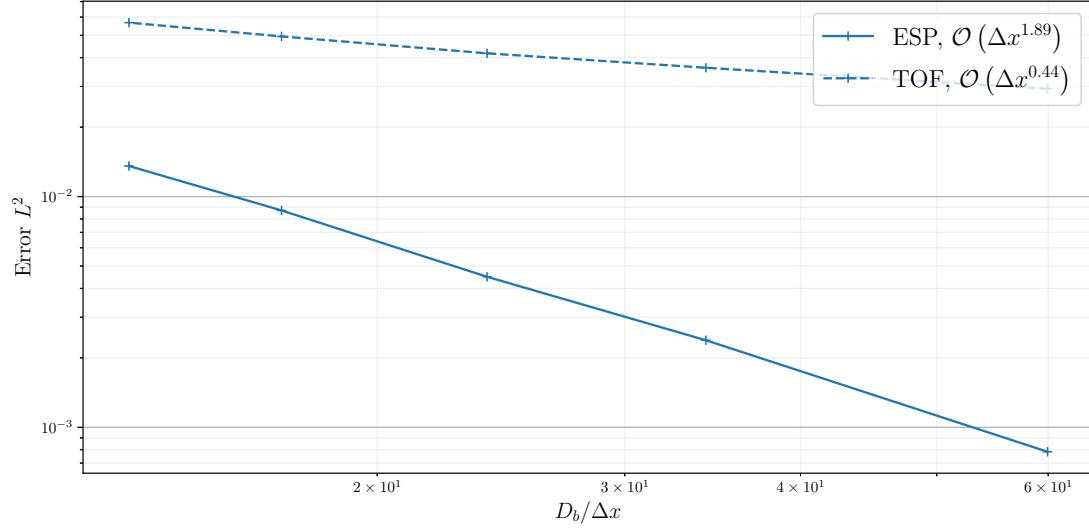


Figure 5.19 – L^2 error compared to a non-convected reference solution.

with a consistent ρc_p over time, but it is not the case for the stability. The temperature has to be reconstructed with particular care so as to have a stable numerical scheme and a correct assessment of diffusive fluxes. Finally, a conservative formulation (Energy with Single-Phase fluxes, ESP) was proposed, with good interfacial temperature prediction (see Sec. 5.3.2) by discarding some approximations. Discontinuous properties are integrated over space and time on the wetted part of the face. Besides, the temperature used in the convective flux and in the heat diffusion flux are not calculated using the temperature of the mixed cell. They are reconstructed from the interface values and values located in the same phase. This new numerical method will be implemented and tested in three-dimensional cases in future works, opening a way to conservative simulations of bubbly flows with highly discontinuous thermal properties in the front-tracking framework.

Résumé du chapitre en français

Dans cet article, la propriété de conservation d'énergie de différentes formulations numériques a été évaluée pour l'équation de température sans changement de phase dans le cadre du volume fini avec front-tracking. Dans un premier temps, la méthode naturelle considérant la température comme une variable monofluide a été améliorée (voir Sec. 5.1.8) pour résoudre le problème de la condition d'interface qui apparaît sans cette modification (voir Figs. 5.3a et 5.3b) dans un cas de diffusion pure. Mais cette formulation améliorée ne permet toujours pas de conserver l'énergie thermique dans le fluide. Une erreur de 50% est faite. Plusieurs formulations nouvelles et originales sont déterminées et testées. Nous montrons que tant que l'équation est écrite comme la dérivée temporelle de la température (et non de l'énergie), elle ne tient pas la conservation de l'énergie dans une simulation complète de convection-diffusion (voir Sec. 5.2.1). Avec une équation d'évolution de température, la conservation n'est pas atteinte à cause de la discontinuité de la capacité thermique entre les phases qui empêche d'écrire l'équation d'une manière conservative (seulement avec des flux). Au contraire, une formulation énergétique est naturellement conservative, à condition que la température soit calculée avec un ρc_p constant dans le temps. En revanche elle n'est pas nécessairement stable. La température doit être reconstruite avec un soin particulier afin d'avoir un schéma numérique stable. Finalement, une formulation conservatrice (Energy with Single-Phase fluxes, ESP) a été obtenue, avec une bonne prédiction de la température interfaciale (voir Sec. 5.3.2) en écartant certaines approximations. Les propriétés discontinues sont intégrées dans l'espace et le temps sur la partie mouillée de la face. De plus, les températures utilisées dans le flux convectif et dans le flux de diffusion de la chaleur ne sont pas calculées à partir des températures des cellules diphasiques. Elles sont reconstruites à partir des valeurs de l'interface et des valeurs situées dans le même fluide.

Application en trois dimensions de la formulation conservative

Sommaire du présent chapitre

6.1 Études 1D du passage en 3D de la méthode ESP	190
6.1.1 Correction des flux aux faces non diphasiques	192
6.1.2 Intégration en temps des fractions de surface mouillées	193
6.1.3 Utilisation de températures ghosts	194
6.1.4 Correction du flux diffusif	196
6.1.5 Formulation implémentée dans TrioIJK	198
6.2 Méthode numérique en 3D	199
6.2.1 Le calcul des faces mouillées	199
6.2.2 Interpolation de la température à l'interface	201
6.2.3 Interpolation de la température pour le calcul du flux convectif aux faces diphasiques	205
6.2.4 L'interpolation de la température pour le flux convectif avec les cellules ghosts	207
6.2.5 Résumé des étapes de correction du flux à proximité de l'interface	209
6.3 Cas test de validation	210
6.3.1 Validation de l'interpolation de la température à l'interface	210
6.3.2 Validation du calcul des faces mouillées et du barycentre	212
6.3.3 Validation globale	213
Conclusions	214

Dans ce chapitre, le travail qui a été réalisé en dimension 1 est porté dans le code TrioCFD-IJK en trois dimensions. Ce travail a demandé un effort d'implémentation important car la structure initiale de TrioCFD-IJK a dû être adaptée afin de permettre une modification des flux calculés aux faces des cellules et d'implémenter une nouvelle équation en énergie. Ce travail ayant eu lieu à la fin de la thèse, seuls des cas tests simples sont réalisés.

6.1 Études 1D du passage en 3D de la méthode ESP

Dans cette section, l'objectif est d'arriver à une solution implémentable dans le code TrioCFD-IJK . Aussi des compromis sont fait pour faciliter l'implémentation dans le code existant et d'autres développements sont dus aux spécificités du 3D qui ne sont pas retrouvées en 1D et n'étaient pas pris en compte dans la formulation présentée au Chap 5. L'équation s'écrit sous la forme générale :

$$\rho c_p^{(n+1)} T^{(n+1)} - \rho c_p^{(n)} T^{(n)} = -\frac{1}{V} \sum_f \sum_k \rho c_{pk} T_{f_k}^{(n)} S_{f_k}^{(n+1/2)} + \frac{1}{V} \sum_f q_f^{(n)} S_f \quad (6.1)$$

avec

$$T_{f_k} = \begin{cases} \text{QUICK}(T_{\text{monofluide}}) & \text{si Interface } \notin \text{Stencil}(f_k), \\ \text{Interp.}(T_{\text{monophasique}}, T_I, q_I) & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.2)$$

Plusieurs méthodes de discrétisations peuvent être utilisées. Des simplifications successives de la méthode ESP sont évaluées, dans l'ordre logique dans lequel elles ont été réalisées. Ainsi, dans un premier temps nous évaluons s'il est possible de ne corriger le schéma monofluide qu'aux faces rouges de la la Fig. 6.1. Puis nous nous remplaçons la méthode d'intégration en temps géométrique par une méthode approchée par nécessité. Ensuite, nous adaptons l'interpolation de la température à l'interface dans un cas 3D. Enfin, nous étudions la possibilité de ne corriger que le flux convectif, principale source d'erreur dans la perte d'énergie dans la formulation monofluide. Les notations présentées Tab. 6.1 sont utilisées dans les légendes pour désigner les choix correspondants.

Les différents changements proposés pour la formulation sont tous implémentés en 1D et évalués dans un premier temps, afin d'être validés en vue de leur implémentation dans le cas 3D. Cette validation est faite sur la simulation d'une bulle 1D aux paramètres thermiques employés précédemment au Chap. 5 présentés Tab. 5.1. Les paramètres numériques utilisés sont ceux reportés Tab. 6.2. Les profils sont étudiés après 0,05 s de simulation, ce qui correspond au parcours d'une fois le domaine par la bulle.

TABLEAU 6.1 – Nomenclature de la mise en place des différentes méthodes de discrétisation à proximité de l’interface.

Catégorie	Discrétisation pour le 1D	Solution adaptée au 3D
Flux convectif	Qref : schéma quick avec la température de l’interface.	Qg : schéma quick avec des températures ghosts. Qm : schéma quick mono-fluide.
Flux diffusif	Dref : Correction du flux diffusif.	Dm : Diffusion mono-fluide.
Intégration temporelle	Int : Intégration analytique de la fraction de surface vapeur.	CN : schéma Cranck-Nicolson pour intégrer les fractions de surface.

TABLEAU 6.2 – Paramètres numériques utilisés dans la validation des modifications étudiées pour le passage au 3D.

$D_b/\Delta x$	—	80
Δx	m	$1,50 \times 10^{-5}$
CFL_{\max}	—	0,50
Fo_{\max}	—	0,50
Δt (lim. par Fo)	s	$5,10 \times 10^{-7}$
Schéma temporel		RK3
Schéma convection		QUICK
Schéma diffusion		Centré 2

6.1.1 Correction des flux aux faces non diphasiques

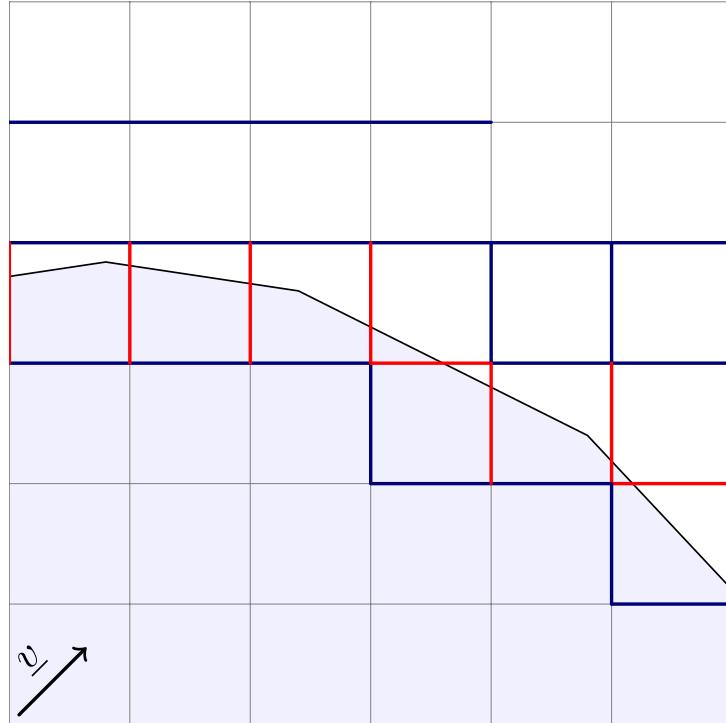


FIGURE 6.1 – Schéma des différents types de face selon la position de l’interface. En gris fin les faces loin de l’interface, en bleu foncé les faces dont le stencil d’interpolation QUICK contient une cellule diphasique et en rouge les faces coupées par l’interface.

Ici des tests sont faits en 1D, pour déterminer s’il est envisageable de ne pas corriger les flux aux faces bleu foncé sur la Fig. 6.1 (le cas 2D est représenté mais chaque direction étant traitée indépendamment, il s’agit des mêmes faces dans le cas 1D). Ces faces n’étant pas traversées par l’interface, on peut se demander si l’erreur d’interpolation de température est vraiment rédhibitoire sur la précision de la solution obtenue (cela ne change pas le caractère conservatif de la solution).

Dans la mesure où en une dimension les faces sont toujours monophasiques, le seul moment où le flux est corrigé est le moment où l’interface passe à travers la face dans le pas de temps. Cette correction utilise la température interpolée à la face au temps (n), à partir de la température interpolée à l’interface, et corrige l’intégrale temporelle du flux à l’aide de l’intégrale de S_{f_k} au cours du temps. Elle ne corrige pas le calcul des flux aux faces non diphasique (équivalent aux faces en gris et bleu Fig. 6.1), c’est-à-dire qui ne sont pas traversées par l’interface au cours du pas de temps. En 1D, sur certains pas de temps, il peut n’y avoir aucune face

traversée par l'interface. En particulier, les faces bleu utilisent pour le calcul des flux les températures au centre de certaines cellules diphasiques, et non une valeur interpolée à l'interface dans un schéma particulier. Le cas unidimensionnel semble donc être un cas particulier peu favorable à la non-correction des flux aux faces monophasiques. Cependant comme ce cas unidimensionnel se retrouve à chaque endroit où l'interface est parallèle à une face, il reste dimensionnant pour le cas général.

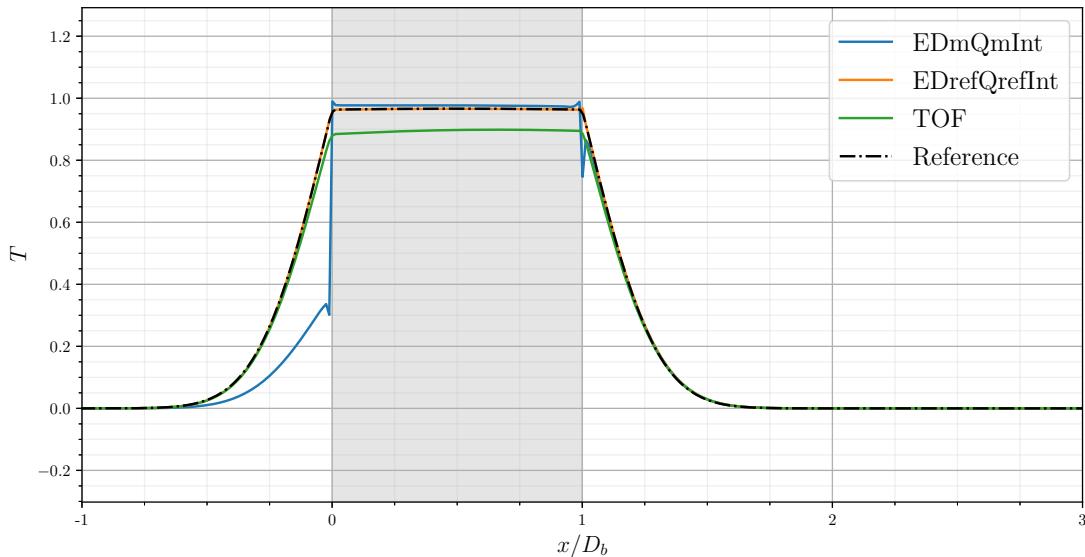


FIGURE 6.2 – Profil de température obtenu avec la formulation ESP sans la correction des flux convectif et diffusif des faces qui ne sont pas diphasiques.

La Fig. 6.2 montre que le profil de température est assez éloigné du profil de référence en amont de la bulle. Cette forme simplifiée conduit à une erreur importante en amont de la bulle avec une très forte sous-estimation. La Fig. 6.2 présente aussi la solution TOF correspondant à la version “classique” actuellement implémentée dans le code TrioIJK. L’implémentation d’une correction des flux aux faces monophasiques mais proches de l’interface est donc de mise.

6.1.2 Intégration en temps des fractions de surface mouillées

L’intégration des faces mouillées au cours du temps semble être un point important dans la formulation unidimensionnelle. Cependant, en trois dimensions, la complexité géométrique ne permet pas d’intégrer la surface mouillée géométriquement sur un pas de temps. Il n’existe à notre connaissance pas de formule analytique permettant de calculer l’intégrale de la surface au cours du temps d’un

rectangle coupé par une surface composée de triangles qui se déplacent. Ainsi dans le cadre de cette thèse, l'intégrale temporelle de cette surface est approximée simplement avec un schéma centré en temps, le schéma Cranck-Nicolson :

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} S_{f_k} dt \approx \frac{S_{f_k}^{(n)} + S_{f_k}^{(n+1)}}{2}. \quad (6.3)$$

Le passage du schéma utilisé au Chap. 5 à l'utilisation d'un schéma Cranck-Nicolson donne les résultats présentés Fig. 6.3. La méthode Cranck-Nicolson donne des résultats excellents, quasiment indiscernables de l'intégration géométrique quand elle est couplé au schéma RK3 utilisé ici. En revanche, ce n'est plus le cas avec le schéma Euler, où les différences sont plus visibles.

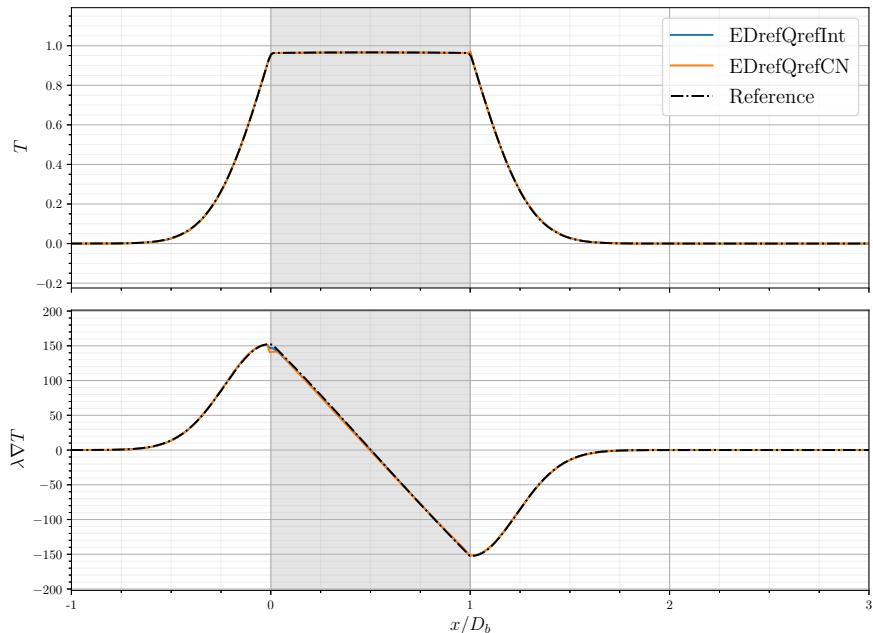


FIGURE 6.3 – Comparaison des profils de température après 0,05 s avec l'intégration exacte de surface mouillées au cours du temps lors du franchissement des faces par l'interface, et en utilisant la méthode Cranck-Nicolson.

6.1.3 Utilisation de températures ghost pour l'interpolation des flux et nouveaux schémas d'interpolation

La correction du flux convectif utilisée dans le cas de la formulation ESP utilise des interpolations linéaires de différents ordres se servant de la température

et du flux thermique à l'interface. Cette interpolation repose sur le fait qu'en une dimension le flux normal est aligné avec les points utilisés pour l'interpolation. Ce n'est pas le cas en trois dimensions. Une possibilité est d'avoir recours, comme pour l'interpolation de la température et du flux à l'interface, à des interpolations de températures monophasiques lointaines sur une droite qui passe par le point d'interpolation final (le centre de la face monophasique) et alignée avec la normale à l'interface. Le problème de cette approche repose dans l'éloignement entre la face monophasique et le point où l'on souhaite faire notre interpolation. Il faudrait pouvoir calculer la position du point sur l'interface le plus proche d'un point quelconque dans le domaine. Bien que ce genre d'algorithme existe, ils demandent soit un temps de calcul important, soit une mise en place complexe.

La méthode retenue pour le 3D est donc celle du calcul de températures ghosts aux centre des mailles diphasiques. Le terme ghost désigne le fait que deux températures sont interpolées dans les cellules diphasiques, au centre de la cellule, comme si la phase était prolongée et qu'il n'y avait pas d'interface. L'une de ces températures correspond à la phase qui est réellement présente et l'autre non. Le passage par des températures ghost à l'avantage de revenir au cas classique 3D utilisé dans IJK. Traiter des températures aux centres des mailles est beaucoup plus simple dans la pratique que d'utiliser des températures qui ne sont pas localisées dans l'alignement des autres. Les températures ghosts sont interpolées avec

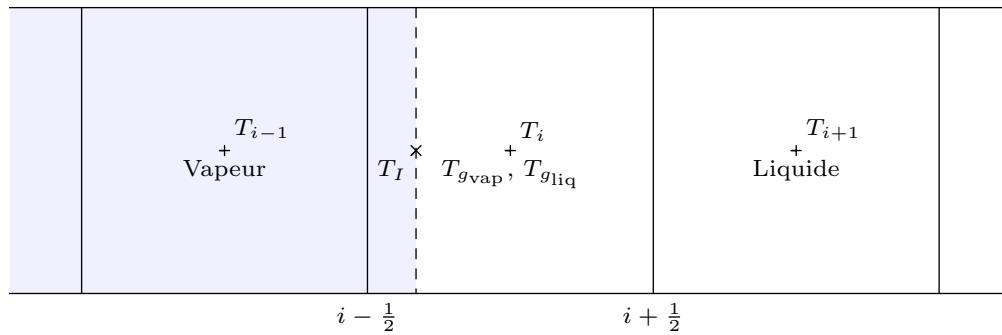


FIGURE 6.4 – Schéma des notations utilisées pour le calcul des températures ghost dans des cellules en une dimension.

un schéma d'ordre 1 à partir de la valeur à l'interface et du gradient correspondant à chaque phase. La température $T_{g_{\text{vap}}}$ est utilisée avec T_{i-1} et T_{i-2} pour calculer la température à la face en $i - 1/2$ avec un schéma QUICK pour le flux convectif. La température $T_{g_{\text{liq}}}$ est utilisée avec les températures T_{i+1} et T_{i+2} pour le calcul avec un schéma QUICK de la température à la face $i + 3/2$. Pour la face $i + 1/2$

la température est calculée à partir de $T_{g_{liq}}$ et du gradient interpolé à l'interface avec une extrapolation amont d'ordre 1.

La Fig. 6.5 montre que la différence entre les deux méthodes d'interpolation de la température a un effet minime sur le profil de température. Cela semble raisonnable car dans les deux cas, l'ordre d'interpolation minimum utilisé est l'ordre 1. Il n'y a donc pas un schéma d'un ordre plus grand que l'autre proche de l'interface. Cependant, une différence est observée sur le calcul du flux amont. Dans la mesure où celui-ci n'est pas post-traité localement, cette erreur est acceptable. En faisant ce compromis, le changement proposé répond aux contraintes d'implémentation tri-dimensionnelle.

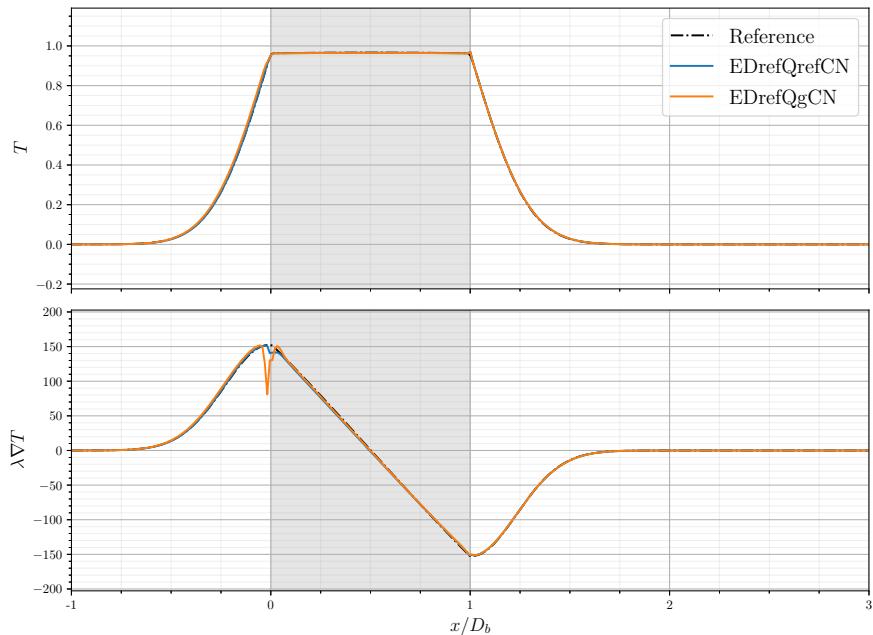


FIGURE 6.5 – Comparaison des résultats obtenus en ayant recours à un flux convectif calculé à partir d'une température ghost, sans utiliser directement la température interpolée à l'interface.

6.1.4 Correction du flux diffusif

Cette dernière étude est d'un ordre purement pratique, visant à réduire les modifications à apporter au code 3D TrioCFD-IJK. Est-il nécessaire de corriger aussi le flux diffusif en plus du flux convectif ? Les études précédentes montrent que l'influence du terme convectif est prédominante dans la formulation en énergie pour obtenir un bon profil, et qu'il est prédominant en température sur la perte

d'énergie thermique dans le domaine. Afin de simplifier l'implémentation en trois dimensions, un test est réalisé sur la correction seule du flux convectif dans la formulation en énergie, dans l'objectif de s'affranchir de la correction sur le flux diffusif, afin de ne pas entreprendre des développements supplémentaires s'ils ne sont pas nécessaires.

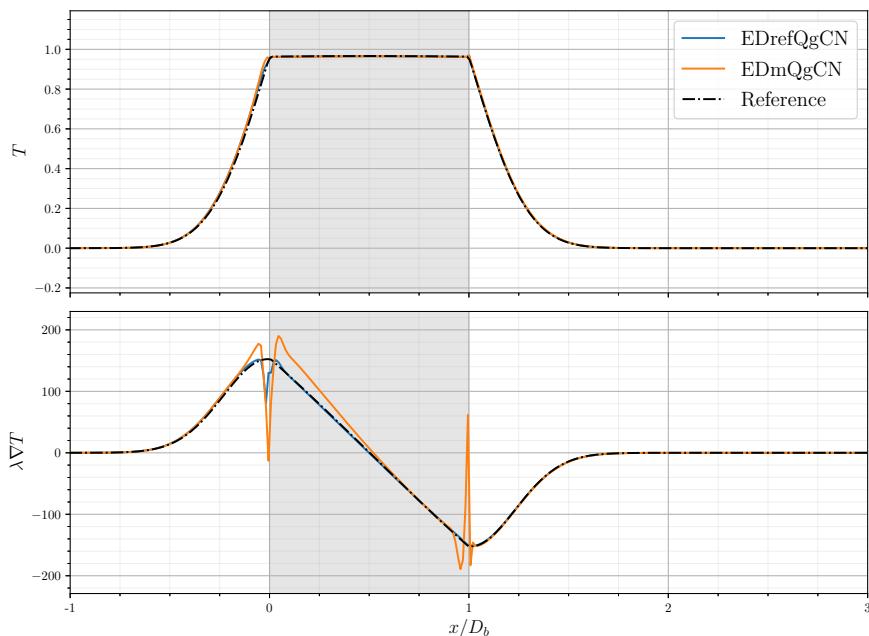


FIGURE 6.6 – Comparaison des profils de température après 0,05 s de simulation sans la correction du flux diffusif.

La Fig. 6.6 montre que la retrait de cette correction, précédemment mise en place en 1D, augmente légèrement l'oscillation de température à l'interface, mais ne modifie pas fondamentalement le profil de température. Ces oscillations se traduisent néanmoins par une moins bonne évaluation du flux à l'interface. L'évaluation du flux interfacial sera beaucoup plus difficile sans cette correction. Néanmoins, pour réduire l'effort de développement, cette correction du flux diffusif ne sera pas mise en place en 3D. Ce compromis n'est donc pas souhaitable à terme.

6.1.5 Formulation retenue pour l'implémentation 3D dans TrioIJK

Résumé des choix pour la formulation retenue

La formulation 3D retenue présente donc les caractéristiques suivantes :

- Le flux convectif est corrigé aux faces diphasiques, mais aussi aux faces qui ont dans leur stencil d'interpolation une cellule diphasique (faces bleu et rouge). Cette double correction est essentielle pour obtenir un profil de température acceptable proche de l'interface.
- Les surfaces mouillées seront intégrées sur le pas de temps en utilisant le schéma de Cranck-Nicolson. La différence entre une intégration exacte et une intégration avec ce schéma est minime dans le cas du schéma RK3.
- Le flux convectif est corrigé de la manière suivante proche des interfaces :
 - Pour les faces bleu, avec un schéma QUICK classique utilisant une valeur ghost à la place de la valeur monofluide.
 - Pour les faces rouges en utilisant une extrapolation linéaire d'ordre 1 à partir de la valeur ghost et du gradient normal interfacial projeté.
- La correction du flux diffusif est négligée. En effet, elle demanderait des changements trop importants dans le code TrioIJK pour être implémentés dans le cadre de cette thèse. Mais sa mise en place théorique ne représente pas de difficulté particulière et permettrait d'améliorer la solution et très largement l'estimation des flux interfaciaux. Si des efforts doivent être faits pour améliorer ce schéma, c'est par cette correction qu'il faudra commencer.

Elle s'écrit :

$$\rho c_p^{(n+1)} T^{(n+1)} - \rho c_p^{(n)} T^{(n)} = \frac{1}{V_{cell}} \sum_f \sum_k \rho c_{p_k} \frac{S_{f_k}^{(n+1)} + S_{f_k}^{(n)}}{2} T_{f_k} v_f + \frac{1}{V_{cell}} \sum_f \lambda_{h_f} \nabla T_f \cdot \underline{n}_f S_f \quad (6.4)$$

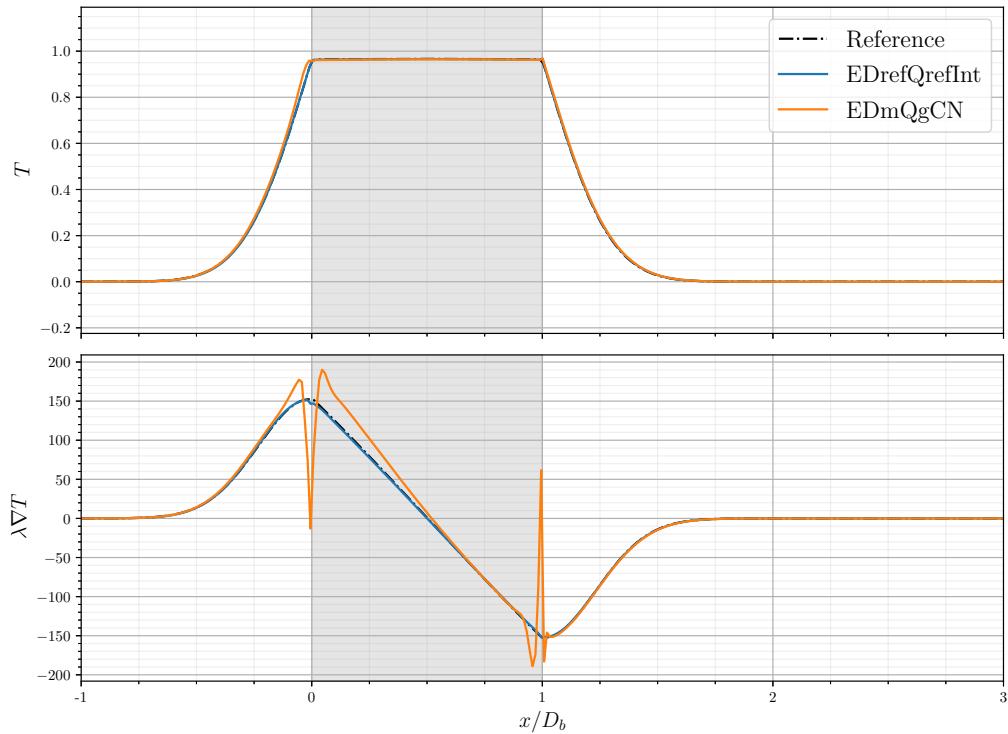


FIGURE 6.7 – Comparaison de la solution obtenue avec la formulation ESP et la formulation adaptée pour un cas 3D.

6.2 Méthode numérique en 3D

La formulation et sa discréttisation présentée dans la Sec. 6.1 demande d'avoir recours à davantage de valeur géométriques résultants de l'intersection entre le maillage Lagrangien des bulles et le maillage Eulérien du domaine que précédemment. Ainsi, les barycentres et surfaces des fractions de faces mouillées par la vapeur, la normale moyenne d'une interface dans une cellule et la normale moyenne d'une interface entre deux cellules sont nécessaires au calcul de la correction du flux convectif d'énergie thermique.

6.2.1 Le calcul des faces mouillées

Pour calculer avec précision le flux convectif d'énergie thermique aux faces de chaque cellule, il faut connaître la fraction de face occupée par chaque phase.

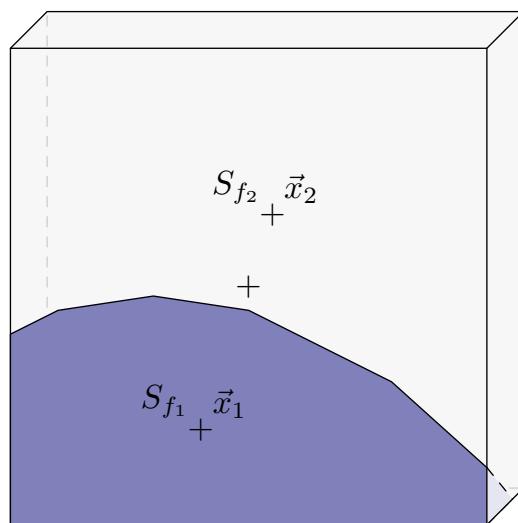


FIGURE 6.8 – Schéma d'une cellule traversée par une bulle pleine en coupe, visualisation de la surface mouillée par la bulle sur une face de la cellule et de son barycentre.

En 1D ce calcul n'avait pas besoin d'être réalisé car l'interface était systématiquement considérée parallèle aux faces des cellules. Désormais dans la majorité des cas, l'interface intersecte les faces des cellules. Cela présente un avantage et un inconvénient. L'avantage est le passage plus doux de l'interface à travers une face. A priori l'interface met plusieurs pas de temps avant de traverser une face complètement. Cet avantage est compensé par l'absence de formulation analytique permettant d'intégrer la fraction de surface au cours d'un pas de temps. Ce calcul est approximé avec un schéma temporel de type Cranck-Nicolson, cf. Éq. (6.3).

L'algorithme de calcul de la surface occupée par la vapeur sur une face du maillage est décrit ci-dessous en Python par simplicité à des fins démonstratives, mais est implémenté en C++ dans TrioCFD-IJK.

Algorithme de calcul des surfaces mouillées

```

1 surfaces_vapeur_par_face = Tableau.initialise(maillage_euler)
2 barycentres_vapeur_par_face = Tableau.initialise(maillage_euler,3)
3 for d in ['i','j','k']:
4     grille = maillage_euler.construit_grille_dans_la_direction(d)
5     for i, coordonnee_coupe in enumerate(
6         maillage_euler.get_faces_dans_la_direction(d)):
7         tranche_bulles = bulles.coupe(d, coordonnee_coupe)
8         fusion, indices_correspondance_avec_grille = \
9             decoupe_maillage_2d_avec_ligne(grille, tranche_bulles)
10        surfaces, barycentres = calcule_surfaces_2d(fusion)
11        indices_phase_vapeur = recupere_phase_vapeur_par_face(
12            fusion,
13            indices_correspondance_avec_grille)
14        surfaces_vapeur = surfaces[indices_phase_vapeur]
15        barycentres_vapeur = barycentres[indices_phase_vapeur]
16        surfaces_vapeur_par_face.set(surfaces_vapeur, d, i)
17        barycentres_vapeur_par_face.set(barycentres_vapeur, d, i)

```

Le calcul de la coupe de plusieurs bulles par un plan, de la découpe d'un maillage cartésien 2D par un ensemble de lignes brisées (coupe de bulles) et enfin de la surfaces des polygones qui constituent les cellules obtenues par cette découpe sont effectués à l'aide du code open-source MEDCoupling, développé en partenariat avec EDF au CEA.

6.2.2 Interpolation de la température à l'interface

Pour calculer la température interfaciale et le flux interfacial il est aussi nécessaire de modifier la méthode utilisée en dimension 1. En effet, dans le cas unidimen-

sionnel, les points monophasiques à proximité de l'interface sont situés de manière pratique dans l'alignement avec la normale à l'interface. Ce n'est évidemment que très rarement le cas en 3D. De plus, les mailles à proximité immédiate de l'interface sont aussi très probablement diphasiques. L'utilisation des valeurs de température aux cellules pour le calcul des flux mène à de grandes imprécisions de la méthode de convection de l'énergie. Ainsi il faut s'assurer que les températures utilisées pour trouver la température interfaciale sont bien monophasiques. Selon l'objectif d'interpolation de la température à l'interface, pour réaliser une interpolation aux fractions de face mouillées par le liquide ou la vapeur, ou pour interpoler les températures ghosts aux centres des mailles IJK, une interface moyenne différente est utilisée, mais le processus est identique. L'interpolation est représentée Fig. 6.9. Des valeurs monophasiques ($T_{l_{\text{interp.}}}$ et $T_{v_{\text{interp.}}}$) sont interpolées à distance fixe d_{3D} de l'interface dans la direction normale moyenne de celle-ci, dont la valeur est décrite Sec. 6.2.2. Cette interpolation est réalisée de part et d'autre de l'interface avec la méthode décrite Sec. 6.2.2. Puis une interpolation d'ordre 1 est réalisée à partir de ces deux valeurs et des conductivités thermiques liquide et vapeur :

$$\lambda_l \frac{T_{l_{\text{interp.}}} - T_I}{d_{3D}} = \lambda_v \frac{T_I - T_{v_{\text{interp.}}}}{d_{3D}}. \quad (6.5)$$

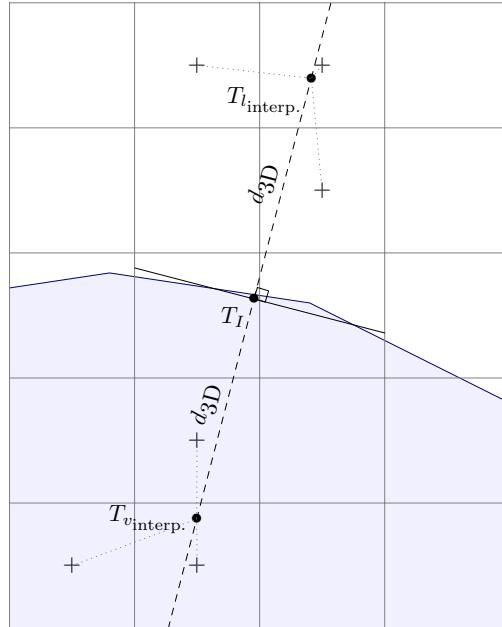


FIGURE 6.9 – Schéma d'interpolation de la température à l'interface.

Interpolation monophasique dans un tétraèdre

L'interpolation dans un tétraèdre est faite de la manière suivante. Selon la position du point d'interpolation I dans la cellule, les valeurs de température en 4 points sont utilisées :

- (i, j, k) ,
- $(i - 1, j, k)$ ou $(i + 1, j, k)$,
- $(i, j - 1, k)$ ou $(i, j + 1, k)$
- et $(i, j, k - 1)$ ou $(i, j, k + 1)$.

Les 4 points ainsi choisis forment un tétraèdre comme représenté Fig. 6.10. Des gradients de température sont calculés dans les 3 directions et appliqués à partir du sommet présent dans la cellule dans laquelle se situe le point d'interpolation. L'interpolation s'écrit donc :

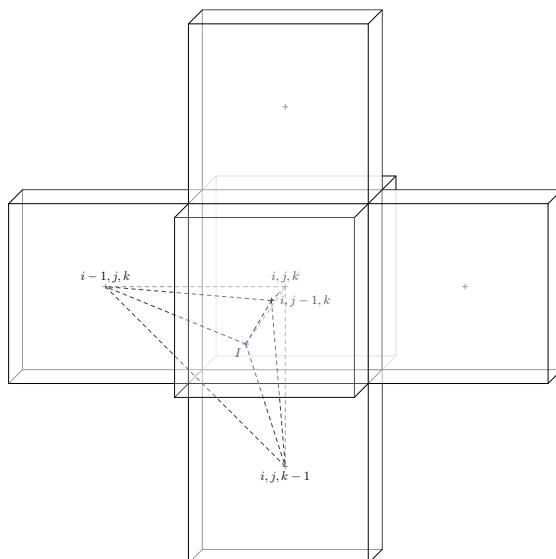


FIGURE 6.10 – Schéma des cellules considérées pour l'interpolation monophasique proche de l'interface. En bleu le point I où l'interpolation est réalisée. Ce point se situe dans la cellule centrale.

$$T(\mathbf{x}_I) = T_{i,j,k} + \nabla T_{i,j,k} \cdot (\mathbf{x}_I - \mathbf{x}_{i,j,k}) \quad (6.6)$$

Distance à l'interface pour une interpolation monophasique

Il est important pour le calcul des gradients et donc de l'interpolation de s'assurer que toutes les cellules sont entièrement monophasiques. Ainsi, la distance à

l’interface à laquelle est interpolé cette valeur monophasique doit être choisie suffisamment grande. Le pire des cas est représenté Fig. 6.11. Dans cette configuration, l’interface passe dans le coin de la cellule dessinée le plus à droite. Cette cellule est donc diphasique et sa température ne doit pas être utilisée pour l’interpolation. Le centre de la maille est en rouge. Dans le pire des cas, la normale à cette interface suit la direction du segment représenté. Dans ces conditions, la distance minimum pour que la température soit calculée au point d’interpolation sans utiliser la température de la maille de droite est donc de $d_{\min} = \sqrt{(1.5\Delta x)^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2}$. Dans les cas de maillages cartésiens anisotropes, il faut prendre le maximum de

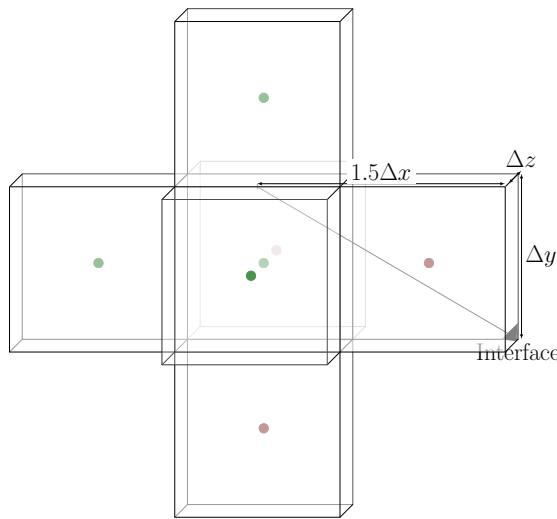


FIGURE 6.11 – Distance minimum d’interpolation dans le pire des cas. Les points verts représentent les centres des cellules dont la température est utilisée pour l’interpolation.

cette distance sur les permutations de x , y et z . Dans ce cas-là, rendre la distance d’interpolation dépendante de la direction de la normale à l’interface pourrait permettre de réduire cette distance dans un grand nombre de cas. Mais comme la configuration qui nous intéresse est celle d’un essaim homogène de bulles, porté par un maillage isotrope, cette piste n’a pas été explorée. Il est à noter que dans le cas d’essaims de bulles, cette distance peut être occasionnellement plus grande que la distance entre deux bulles. Pour éviter au maximum ce cas-là, avec une interpolation hasardeuse de la température mélangeant des températures des deux phases, associée à une mauvaise description de l’écoulement liquide entre les deux interfaces, une force de répulsion est activée dans les simulations d’essaim sur une distance égale au double de cette distance minimum. Cette force de répulsion déjà

en place dans les simulations présentées au Chap. 3 permet d'éviter les collisions de bulles, le code ne prenant pas en compte le phénomène de coalescence. Son utilisation limite dans la pratique les taux de vides pouvant être étudiés aux taux de vides suffisamment faibles ($\lesssim 12\%$), tels que le travail de cette force soit négligeable (c'est-à-dire la distance moyenne entre les bulles grande devant la distance d'activation).

6.2.3 Interpolation de la température pour le calcul du flux convectif aux faces diphasiques

La première correction des flux est effectuée directement aux faces traversées par l'interface. Cette interpolation est représentée Fig. 6.12. Afin de réaliser l'in-

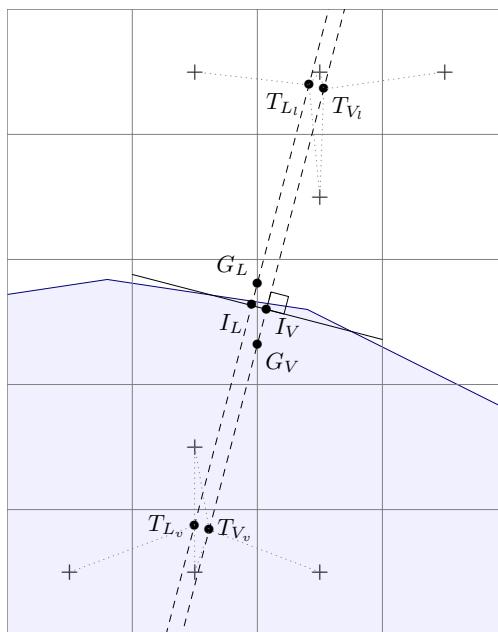


FIGURE 6.12 – Schéma d'interpolation de la température monophasique aux barycentres des faces mouillées G_L et G_V .

terpolation, l'interface est moyennée sur les cellules de part et d'autre de la face (segment noir). Une normale moyenne et un barycentre sont ainsi obtenus et utilisés pour déterminer les positions des températures monophasiques de part et d'autre (T_{L_k} et T_{V_k}), et de la température d'interface (en I_k).

Le recours à une interface plane moyenne permet de ne faire que deux interpolations pour chaque face diphasique et évite les cas particuliers où l'interpolation aurait pu être envisagée aussi bien d'un côté que de l'autre. Ce cas se présente au sommet d'une bulle 2D par exemple, schématisé Fig. 6.13. Les interfaces moyennes

dans chacune des cellules de chaque côté de la face sont dans une direction avec un vecteur normal ayant une composante en x opposée. L'une des faces mouillées présente alors deux points d'interpolation proches de l'interface, et l'autre n'en présente aucun. Cette situation s'améliore évidemment quand la résolution augmente,

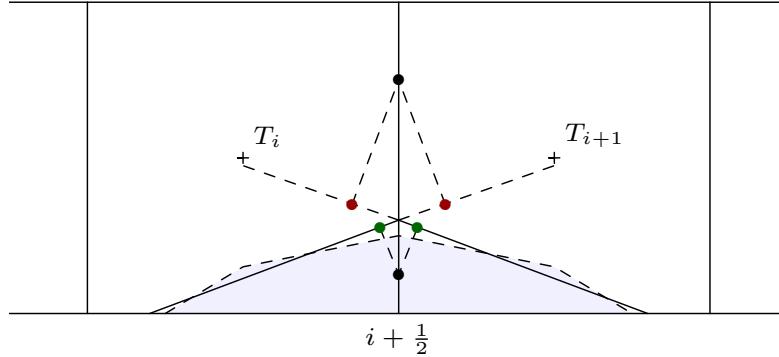


FIGURE 6.13 – Situation où le choix entre les cellules gauches et droites n'est pas souhaitable. Les points d'interpolation rouges sont loin de l'interface, et dans des directions différentes. Les points d'interpolations verts sont proches de l'interface, mais aussi dans des directions différentes.

mais pour éviter ce genre de problèmes géométriques le choix retenu est bien celui de l'utilisation d'une interface moyenne entre les deux cellules horizontales de la Fig. 6.13.

Après l'interpolation des températures monophasiques et interfaciales (T_{K_k} et T_{I_k}), des températures monophasique sont interpolées aux centres de gravité de chacune des fractions de face (G_k). Cette interpolation est faite entre la température interpolée à l'interface et la température monophasique qui avait été interpolée à partir des valeurs cartésiennes pour déterminer la température interfaciale.

Le flux convectif monofluide calculé avec la température monofluide est donc remplacé par le flux suivant :

$$\phi_{\text{conv}} = \sum_k \rho c_{p_k} T_{f_k} S_{f_k}, \quad (6.7)$$

avec $T_{f_k} = \text{Interp.}(T_I, T_{k_{\text{interp}}}).$

6.2.4 L'interpolation de la température pour le flux convectif avec les cellules ghosts

La seconde correction du flux convectif est celle qui est appliquée aux faces monophasiques qui utilisent des valeurs de température diphasique pour l'interpolation QUICK de température aux faces (faces bleu sur la Fig. 6.1). Dans ces cas-là, le flux est remplacé par un flux calculé à partir des valeurs de température ghost. Le calcul est illustré Fig. 6.14. Afin de réaliser l'interpolation, l'interface est

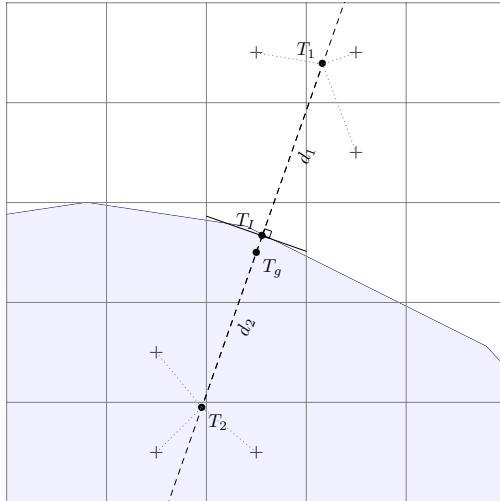


FIGURE 6.14 – Schéma d'interpolation de la température aux cellules ghost.

moyennée dans la cellule. Une normale moyenne et un barycentre sont ainsi obtenus et utilisés pour déterminer les positions des températures monophasiques de part et d'autre, et de la température d'interface. Le recours à une interface plane moyenne permet de ne faire qu'une seule interpolation dans la cellule et évite les cas où la droite passant par le centre de la cellule dans la direction normale à une facette de l'interface coupe le plan formé par la facette trop loin de la position réelle de l'interface.

Deux cas sont distingués, le cas où la face est en amont de l'interface ou en aval mais pas immédiatement (en bleu sur la Fig. 6.15), et le cas où la face est immédiatement aval de l'interface (en vert sur la Fig. 6.15). Ici amont et aval sont bien pris selon le sens de la vitesse de l'écoulement. Dans le premier cas un schéma QUICK classique utilisant l'une des valeurs ghost est utilisé, dans le deuxième une interpolation d'ordre 1 est effectuée en utilisant la température ghost et le gradient de température à l'interface dans la phase correspondante, projeté selon la direction de la face. Ainsi, le flux convectif s'écrit :

$$\phi_{\text{conv}} = \rho c_{pk} T_{fk} S_f, \quad (6.8)$$

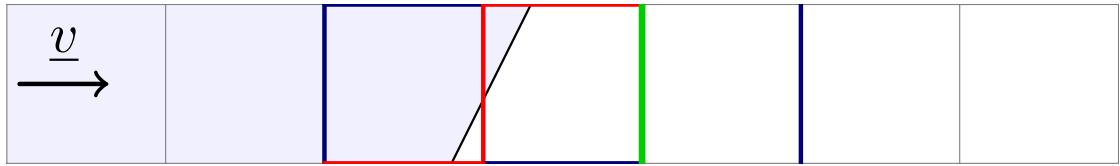


FIGURE 6.15 – Schéma des différents types de faces différenciés pour la correction des flux convectifs. En rouge la face est diphasique, en vert elle est monophasique mais immédiatement en aval d'une cellule diphasique, et en bleu elle est monophasique, dans le stencil du schéma QUICK, mais pas immédiatement en aval de l'interface.

avec $T_{f_k} = \text{QUICK}(T_{g_k}, T_{i\pm 1}, T_{i\pm 2})$ ou $T_{f_k} = T_{g_k} + \nabla T_{I_k} \cdot \mathbf{n}_f \times d_f$, avec d_f la moitié du pas d'espace dans la direction f .

6.2.5 Résumé des étapes de correction du flux à proximité de l'interface

Algorithme de correction du flux convectif

```

1 flux_conv = compute_flux_convection_T_monomfluide(T_mono)
2 T_fk = interpole_temperature_aux_faces_mouillees() # Fig. 6.12
3 T_g, q_I = interpole_temperature_ghost() # Fig. 6.14
4 # f is "i", "j" or "k"
5 for f, face in parcours_faces(maillage_euler):
6     # Les couleurs sont celles de la Fig. 6.15
7     if stencil_quick_inclut_interface(face): # face colorée
8         if face_diphasique(face): # face rouge
9             flux_conv[face] = (
10                 rho_cp['liquide']
11                 * T_fk['liquide'](face)
12                 * (S[f] - S_vapeur_CN[face])
13                 + rho_cp['vapeur']
14                 * T_fk['vapeur'](face)
15                 * S_vapeur_CN[face]
16             ) * vitesse[face]
17         elif face_avale_interface(face): # face verte
18             k = phase(face) # k is "liquide" or "vapeur"
19             flux_conv[face] = (
20                 T_g[k](face.elem)
21                 + scalaire(q_I[face.elem], n[f]) / lda[k]
22                 * maillage_euler.get_delta(f) / 2.
23             ) * vitesse[face] * rho_cp[k] * S[f]
24         else: # face bleu
25             k = phase(face)
26             flux_conv[face] = (
27                 quick_interp_ghost(T_g[k], T_mono, face)
28                 * S[f]
29                 * rho_cp[k]
30                 * vitesse[face]
31             )
32     else: # face grise
33         k = phase(face)
34         flux_conv[face] *= rho_cp[k]

```

6.3 Cas test de validation

6.3.1 Validation de l'interpolation de la température à l'interface

Dans un premier temps, cette validation est faite de manière sommaire. Une rampe de température est initialement mise en place dans un domaine avec une bulle. La bulle a les mêmes propriétés thermiques que le liquide qui l'entoure. La température est interpolée à l'interface. La validation est uniquement visuelle, la Fig. 6.16 montre que la température interpolée se confond avec la température du fluide dans ce plan.

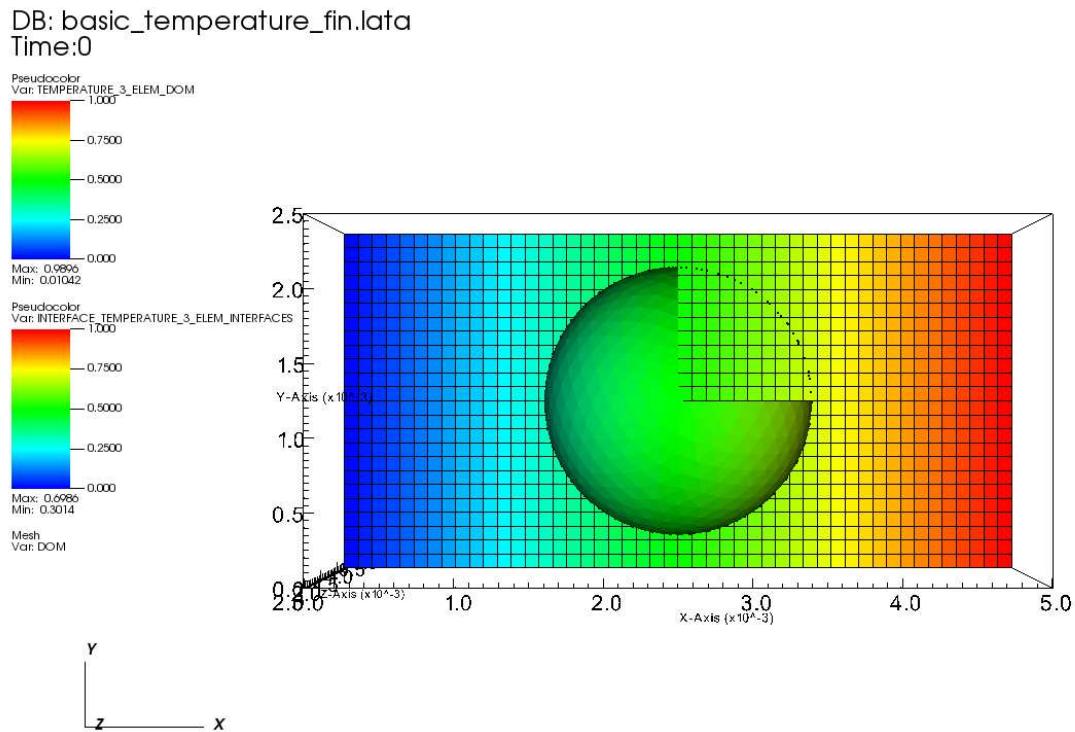


FIGURE 6.16 – Coupe de l'interpolation de la température à l'interface avec une rampe de température en x et des propriétés constantes dans le domaine.

Afin de valider la bonne interpolation en fonction des conductivités thermiques, il suffit de regarder la température qui est interpolée initialement uniformément à l'interface dans un cas où une température constante est imposée dans chaque phase. La Fig. 6.17 montre bien que la température interpolée (0,909) correspond à l'interpolation théorique utilisant seulement les valeurs purement monophasiques de chaque phase avec $T_l = 0$, $T_v = 1$, $\lambda_l = 1$ et $\lambda_v = 100$.

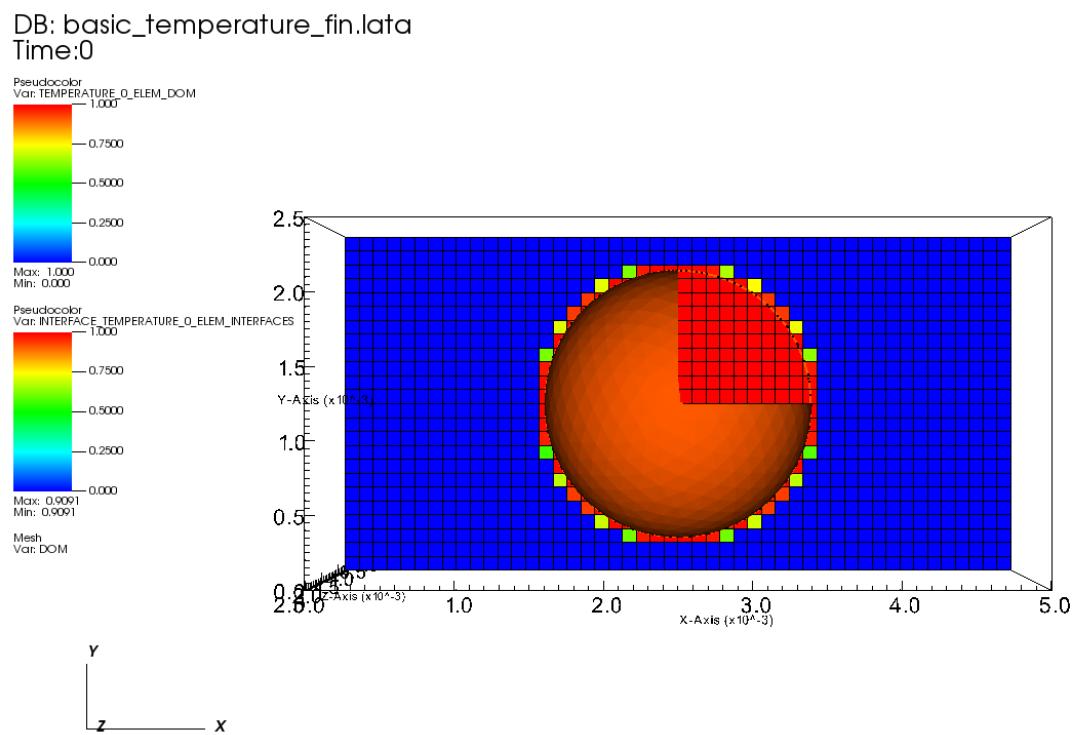


FIGURE 6.17 – Interpolation de la température à l'interface avec une température constante par phase et une conductivité thermique dans la vapeur 100 fois plus grande que dans le liquide.

6.3.2 Validation du calcul des faces mouillées et du barycentre

Le calcul des surfaces mouillées par la phase vapeur devrait être validé rigoureusement en extrayant des surfaces vapeurs par face calculées et en les comparant dans un cas où l'on connaît de manière analytique la valeur de cette surface. Cela étant difficile à mettre en place, pour le moment on se satisfera d'une validation visuelle. Dans toutes les directions, des résultats similaires à ceux observés Fig. 6.18. Cependant les limitations de l'avancement actuel de l'implémentation

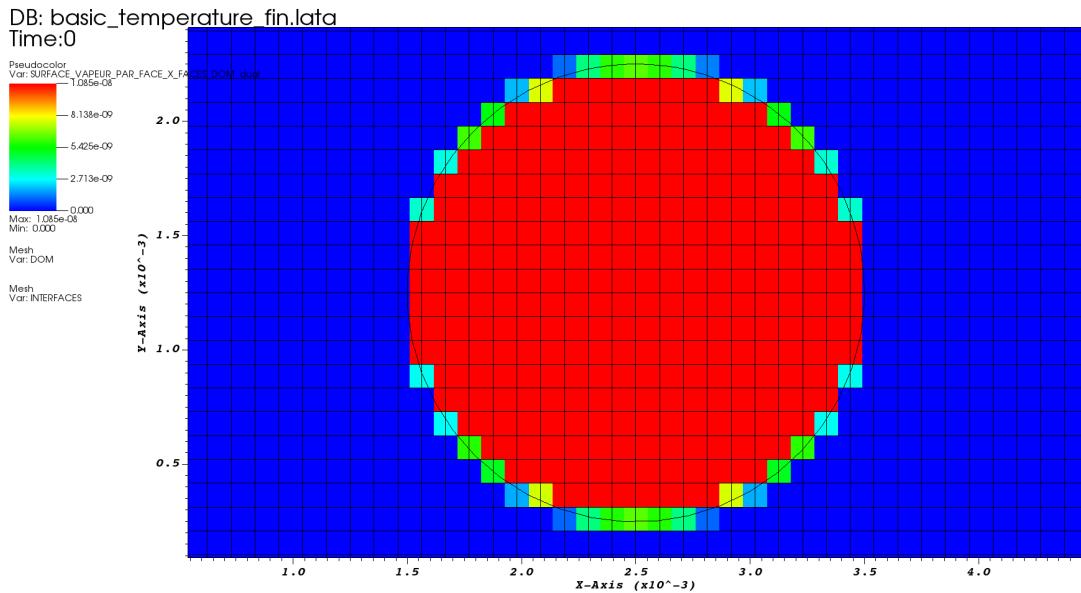


FIGURE 6.18 – Fraction de la surface de la vapeur par face orientée dans la direction x .

de l'algorithme en trois dimensions sont dues à des erreurs dans ce calcul, lors de la présence de trop petites surfaces. Dans ce cas-là, la surface reportée correspond à celle de la mauvaise phase. Un réglage fin de ce problème est nécessaire pour une validation finale.

De la même façon, le calcul des barycentres des fractions de surfaces mouillées est vérifié visuellement. La Fig. 6.19 montre ainsi les valeurs de la composante y pour les faces mouillées orientée dans la direction normale à l'axe x . Comme on peut s'y attendre, la composante y est à peu près uniforme sur une même ligne de cellules en y coupées par l'interface et elle augmente avec la position en y de la face considérée.

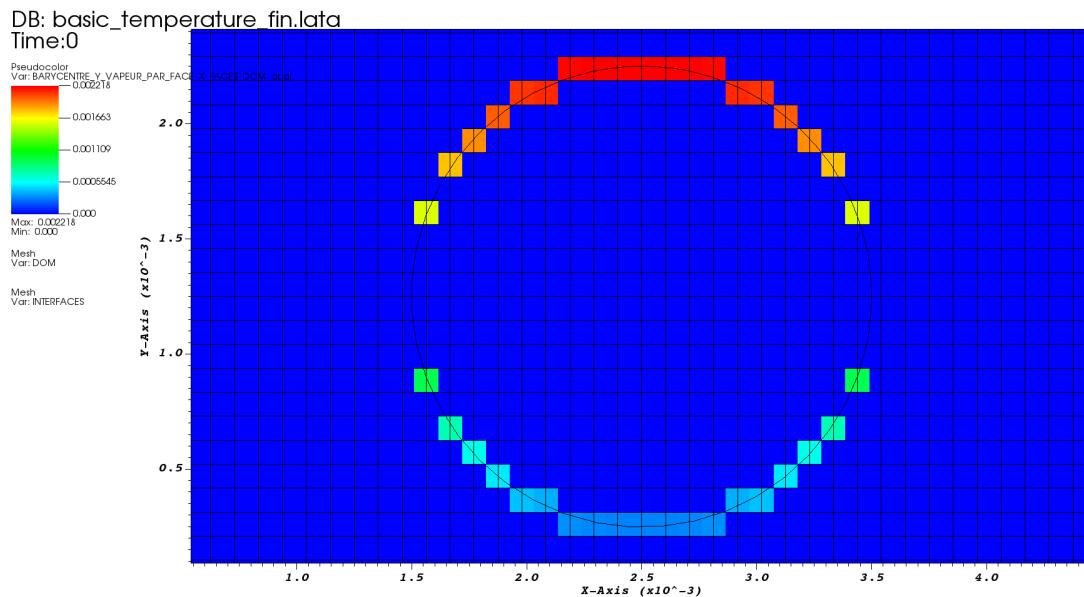


FIGURE 6.19 – Composante dans la direction y de la position du barycentre de la fraction de face vapeur de chaque face diphasique orientée dans la direction x (0 si la face est monophasique).

6.3.3 Validation globale

Pour valider cette formulation complète, le problème vient de l’absence de solution analytiques dans un cas de convection diffusion autour d’une bulle avec saut de propriétés thermiques. Ainsi, un cas test similaire au cas test utilisé dans le cas 1D avec FluidDyn est imaginé. Il consiste à

- convecter et diffuser un créneau initial de température dans la bulle (une température de 1 dans la bulle et de 0 dans le liquide), avec une vitesse constante et dans une direction
- et comparer le résultat obtenu à une simulation de diffusion pure sans convection, avec la bulle initialement localisée au point d’arrivée de la première simulation.

Pour arriver au résultat du deuxième calcul, celui-ci doit être fait en deux étapes. D’abord l’interface est purement convectée, sans champ de température. Cela assure que la comparaison est faite sur des maillages strictement identiques, mais décalés. Puis le calcul de diffusion pure est fait sur la même durée que dans le cas de convection-diffusion, en partant d’un champ de température initialisé de la même manière que le calcul en convection-diffusion, à partir de l’indicatrice.

Conclusions

Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, la formulation retenue au Chap. 5 est adaptée au cas tri-dimensionnel.

Dans un premier temps, la formulation unidimensionnelle est successivement modifiée pour être adaptée d'une part aux exigences du cas tri-dimensionnel, d'autre part pour être simplifiée, dans l'objectif d'être implémentée de manière incrémentale. Ces différentes modifications de la formulation ESP (Energy with Single-Phase fluxes) conservent toujours les points clefs de la réussite de cette formulation, c'est-à-dire une formulation en énergie couplée à un calcul des flux monophasiques, à partir des valeurs interfaciales, et une intégration précise aux faces des propriétés discontinues nécessaires au calcul des flux. Ces évolutions sont évaluées grâce à FluidDyn dans un cas unidimensionnel. Elles conduisent au total à une faible dégradation de la solution, qui semble acceptable pour une première implémentation tri-dimensionnelle.

Puis les différentes interpolations à l'interface sont mises en place en trois dimensions. L'interpolation à l'interface unidimensionnelle est transformée en interpolation selon la normale à l'interface, à partir de températures monophasiques de part et d'autre de l'interface. Elle est essentielle au calcul des températures aux faces pour en déduire les flux convectifs. En effet, ces températures aux faces à proximité de l'interface sont interpolées à partir de températures fantômes calculées dans les cellules diphasiques et des températures de la phase dans laquelle la température est interpolée. Les températures fantômes sont directement issues des interpolations de températures interfaciales. D'autre part, les fractions de surfaces mouillées par la vapeur sont calculées à l'aide d'intersections entre les maillages des bulles et du domaine. La surface des faces intersectées est ensuite réattribuée à la face du domaine fluide traversée par une interface. Ce calcul pose aujourd'hui problème dans certaines configurations où les fractions de faces générées sont très petites. Il s'agit malheureusement d'un problème purement informatique qui n'a pas encore été réglé.

Enfin, des premières validations des travaux numériques réalisés en trois dimensions sont présentées, démontrant le bon fonctionnement de l'algorithme d'interpolation de la température et du calcul des fractions de faces mouillées par la vapeur quand la géométrie ne pose pas de problème.

Conclusion

Sommaire du présent chapitre

Conclusion	215
Perspectives	216
Remerciements	217

Conclusion

Cette thèse s'articule donc en deux parties. La première porte sur la modélisation de transferts thermiques dans les écoulements à bulles en absence de saut de propriétés thermiques. Les résultats obtenus dans cette partie s'appuient sur des simulations numériques directes réalisées grâce au code TrioCFD-IJK. Ce code est utilisé pour simuler des écoulements diphasiques en 3D, il est adapté à la recherche sur les écoulements à bulles et utilise des méthodes numériques telles que le suivi d'interface, la formulation monofluide et les schémas de type volumes finis. Il est capable de simuler plusieurs champs thermiques pour un seul champ dynamique, réduisant ainsi le coût de calcul. La convergence des opérateurs d'interpolation volume finis est validée dans des cas simples. Puis, des exemples de simulations dans des canaux, à la fois monophasiques et diphasiques, sont présentés pour montrer la capacité du code à décrire la température dans des écoulements turbulents. Ces études permettent une validation du code dans ces conditions et des résultats nouveaux. L'évolution du nombre de Nusselt pariétal en fonction du nombre de Prandtl, la dépendance du coefficient de la loi logarithmique thermique au nombre de Prandtl liquide sont analysés en détails. Les transferts thermiques turbulents sont aussi analysés en vue de leur modélisation vis-à-vis des tensions de Reynolds dans une approche moyennée à deux fluides. Enfin, une étude détaillée avec convergence en maillage a été réalisée sur le cas d'un essaim homogène de bulles, avec un taux de vide de 6% et des nombres de Reynolds de bulles entre 200 et 800. Elle met à jour des corrélations de transferts thermiques aux interfaces, dans des essaims,

très proches des corrélations déduites sur des bulles uniques, mais présentant tout de même une intensification des transferts de l'ordre de 10% pour les conditions étudiées.

Dans une seconde partie, une recherche d'un schéma numérique apte à simuler des écoulements avec sauts de propriétés thermiques est menée. À cette fin, le code 1D FluidDyn est développé. FluidDyn est une base légère et souple en Python qui sert à développer et valider de nouveaux schémas de convection-diffusion pour des écoulements à bulles. Il permet une recherche amont sur les schémas numériques pour le suivi de frontière dans le contexte des transferts thermiques. L'architecture générale du code est documentée, elle permet de tester les nombreuses combinaisons possibles de méthodes numériques et d'interpolation pour gérer cette discontinuité aux interfaces. Ces schémas sont validés dans des cas simples pour déterminer leur bon ordre de convergence. Ensuite, un cas complet monophasique est étudié pour une validation générale. Puis, plusieurs études sont menées dans un cas diphasique avec des sauts de propriétés. L'ordre de grandeur de perte d'énergie au cours du temps de la simulation est trouvé comparable entre la simulation unidimensionnelle et le cas de l'essaim de bulles homogène. Différentes formulations en température et en énergie sont étudiées. Ces études permettent de dégager une formulation conservative unidimensionnelle robuste et précise. Les points-clés de cette formulation sont : l'expression en énergie, l'intégration des surfaces mouillées pour chaque phase aux faces pour trouver des propriétés diphasiques précises et la séparation des phases dans l'interpolation des flux en passant par les valeurs interpolées à l'interface. Cette formulation est finalement adaptée au cas tri-dimensionnel, demandant notamment un certain nombre de calculs d'intersections de géométries et d'interpolations, spécifiques au suivi d'interface. Ces développements géométriques permettent aussi l'analyse des champs interpolés aux interfaces dans le cadre de la formulation monofluide en température. Ces statistiques interfaciales sont indispensables pour obtenir les corrélations en essaim présentées dans la première partie.

Perspectives

Cette thèse ouvre finalement de nouvelles pistes dans l'analyse des transferts thermiques en écoulements à bulles, après avoir mis à jour les difficultés de conservation de l'énergie thermique avec la formulation classique monofluide en température en présence de sauts de propriétés. Sans ces sauts de propriétés thermiques, pour la première fois, des études de transferts affectés par un groupe de bulles sur un nombre important de nombres de Prandtl ont été réalisées. Elles permettent non seulement de comparer les résultats obtenus aux corrélations de la littérature, mais aussi de calibrer des modèles avec une bonne fiabilité. Cette particularité des

écoulements avec résolution de champs thermiques indépendants des champs dynamiques continuera à être exploitée avantageusement à l'avenir. Notamment, elle permettra de suivre une démarche de modélisation par effets séparés, similaire à celle réalisée sur la dynamique dans la thèse de DU CLUZEAU [29]. Ainsi les différentes contributions au produit des fluctuations de vitesse-température pourrons être analysées, en ajoutant à l'étude sur la dynamique la dimension thermique, portée par le nombre de Prandtl, sans en augmenter significativement le coût CPU.

Dans une seconde partie, cette thèse, après avoir démontré la non-adéquation du schéma monofluide pour simuler les transferts thermiques dans les écoulements à bulles, a ouvert une nouvelle voie. Les formulations imaginées, évaluées en 1D grâce à FluidDyn, montrent l'importance de l'évaluation précise des valeurs géométriques liées à l'interface et la nécessité de traiter les phase séparément proche de l'interface, tout en prenant en compte les conditions de saut. Dans ce cadre, la méthode front-tracking utilisée dans TrioCFD-IJK s'est révélée tout à fait adaptée, donnant accès à des informations géométriques précises. Une partie conséquente des développements a été réalisée ; des améliorations doivent encore être faites pour compléter la démarche entreprise, ainsi qu'une validation à l'échelle sur un essaim de bulles. Mais ce schéma permettra d'étudier l'influence des sauts de propriétés entre les deux fluides sur les transferts de chaleur.

Les termes de l'équation Euler-Euler de la température qui ont besoin d'une fermeture sont le terme des fluctuations vitesse-température, le terme des flux thermique interfacial et un terme vectoriel de température interfaciale. Des modèles ont été étudiés pour les deux premiers, le troisième terme n'est à notre connaissance pas pris en compte dans les modèles existants, et son étude, grâce aux développements d'interpolations à l'interface réalisés dans cette partie, est désormais envisageable.

Remerciements

L'auteur tient également à exprimer ses sincères remerciements à GENCI et au TGCC pour avoir fourni les ressources informatiques nécessaires pour effectuer les calculs DNS. Ce travail a bénéficié des ressources informatiques de CINES grâce aux allocations A0082b7712 à A0122b7712 attribuées par GENCI. Il aimerait également remercier CEA/DEN pour les ressources informatiques allouées sur les supercalculateurs IRENE au TGCC.

Études complémentaires 1D

Sommaire du présent chapitre

A.1 Études de la formulation couplée Température-Énergie	219
A.2 Full monophasique	221

A.1 Études de la formulation couplée Température-Énergie

Ici nous présenterons les recherches menées sur le couplage température-énergie pour résoudre l'équation de température de manière conservative, en gardant une bonne précision sur l'estimation locale de la température à proximité de l'interface.

Plusieurs méthodes ont été testées, mais elles utilisent toutes le même principe. Deux équations sont résolues simultanément, l'équation formulée en température et celle formulée en énergie :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \frac{1}{dV} \int_{dV} T dV}{\partial t} &= - \oint_{dS} T \underline{v} \cdot \underline{n} dS + \frac{1}{\rho c_p a} \oint_{dS} \underline{q} \cdot \underline{n} dS \\ \frac{\partial \frac{1}{dV} \int_{dV} \rho c_p T dV}{\partial t} &= - \oint_{dS} \rho c_p T \underline{v} \cdot \underline{n} dS + \oint_{dS} \underline{q} \cdot \underline{n} dS \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

L'équation Éq. (A.1) permet de calculer le flux à partir du gradient de T , et de corriger la température de la convection avec des flux utilisant le couple h , T de la maille diphasique. Le flux diffusif dans l'équation en énergie est calculé à partir du champs de température corrigé à l'interface en couplant aussi les informations

de température et d'énergie. Ainsi, le couplage à l'interface s'écrit de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \rho c_{p_1} \alpha_1 T_1 + \rho c_{p_2} \alpha_2 T_2 &= h_{cell} \\ \alpha_1 T_1 + \alpha_2 T_2 &= T_{cell} \\ \lambda_1 \frac{T_I - T_1}{d_1} - \lambda_2 \frac{T_2 - T_I}{d_2} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Ce couplage présente plusieurs avantages. D'une part, la déduction de T_I est locale (utilise les valeurs de la cellule) et ne suppose pas une linéarité sur plusieurs cellules, d'autre part, nous avons désormais accès à la température de la maille ainsi qu'à son énergie, alors que sans les deux équations nous n'avons qu'une seule des deux valeurs.

$$\begin{pmatrix} \rho c_{p_1} \alpha & \rho c_{p_2} (1 - \alpha) \\ \alpha & 1 - \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{cell} \\ T_{cell} \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Cependant plusieurs problèmes peuvent être remarqués avant même de réaliser des tests. D'abord, le système qui permet de trouver T_1 et T_2 n'est pas inversible quand $\alpha = 0$ ou 1 . Dans ce cas là, il est impossible de déduire localement les températures T_1 et T_2 . Si $\alpha_1 = 0$ (respectivement $\alpha_2 = 0$), T_1 (resp. T_2) n'est pas définie, et $T_2 = T_{cell} = h_{cell}/\rho c_{p_2}$. Pour pallier à ce problème, il faut avoir recours à T_{i-1} (resp. à T_{i+1}).

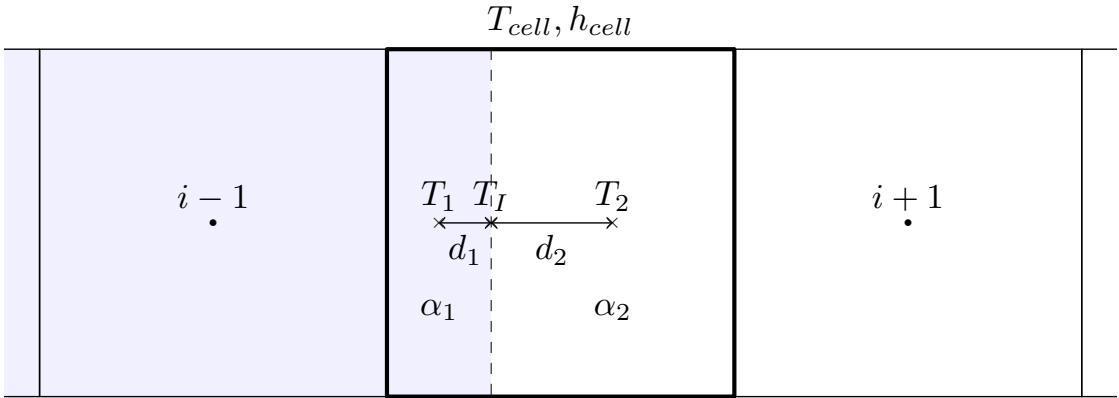


FIGURE A.1 – Variables dans une cellule diphasique dans le cadre du couplage des équations d'énergie et de température.

Ensuite, la résolution du système ne donne pas de garantie sur le fait que T_I soit borné entre T_{i-1} et T_{i+1} . Quand le système est proche de la colinéarité, les

erreurs sur T_{cell} et h_{cell} peuvent mener à de grande variations de T_I .

Ici, le système d'équation est discréétisé en utilisant l'approche monofluide pour la température, avec correction des flux à partir de valeurs monophasiques ou calculées à l'interface. Ce schéma est détaillé Éq. (5.31) en Sec. 5.3.1. Pour ce qui est de l'énergie, elle est discréétisée suivant la méthode en Éq. (5.49) en Sec. 5.3.2.

Après un temps très court de simulation, nous pouvons observer que ce schéma est instable. En effet Fig. A.2 nous voyons bien que la température proche de l'interface diverge alors que l'énergie reste quasiment constante.

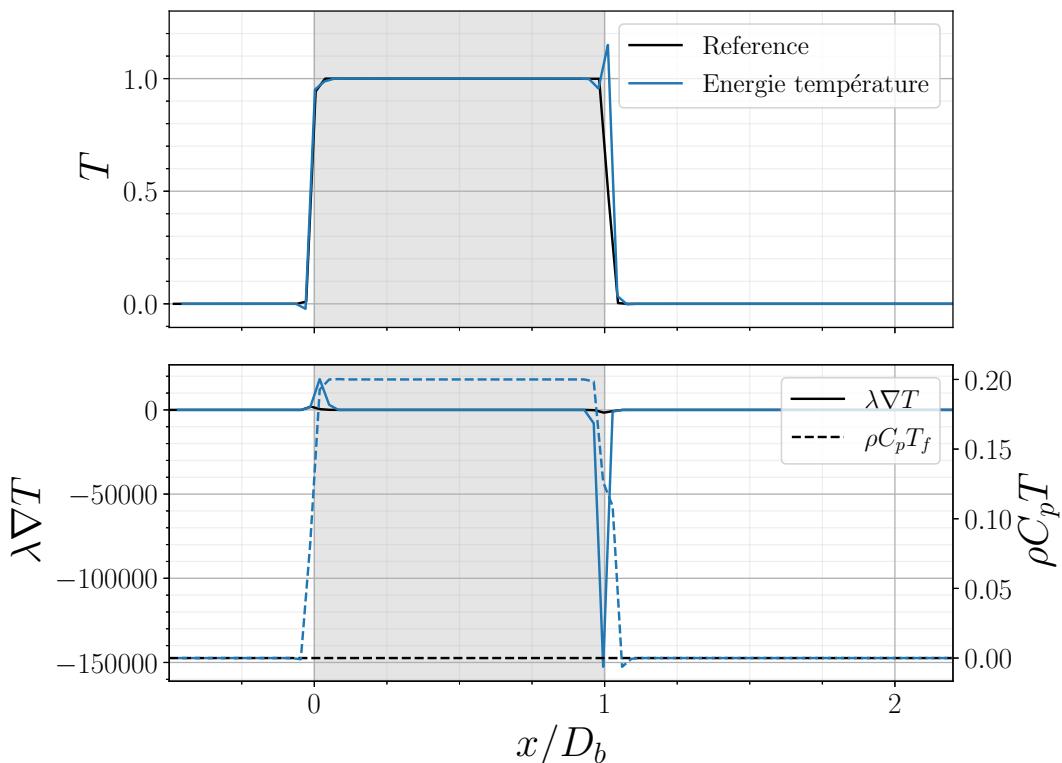


FIGURE A.2 – Profil de température après 2 pas de temps de simulation avec la formulation Énergie-Température.

A.2 Full monophasique

Une approche purement monophasique a été imaginée sans porter de fruits dans le cas unidimensionnel. Cette approche consiste à traiter l'interface comme étant à une face. Pour cela, la cellule contenant l'interface est divisée en deux

parties par celle-ci, et des températures sont calculées aux barycentres de chaque sous-cellules. Une équation spécifique est résolue dans cette cellule pour déterminer l'évolution des températures aux barycentres des sous-cellules. Cette équation prend en compte la convection de l'interface et la condition de saut de gradient de température (ou continuité du flux) entre les deux phases. Dans ce cadre là, on a :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{V_k} \rho_k c_{p_k} T_k dV \right) = \oint_{S_k} \rho_k c_{p_k} T_k (\underline{v}_k - \underline{v}_{S_k}) \cdot \underline{n}_k dS + \oint_{S_k} \lambda_k \nabla T_k \cdot \underline{n}_k dS \quad (\text{A.4})$$

Ce qui donne en reprenant les notations du schéma Fig. A.1,

$$\oint_{S_1} \rho c_{p_1} T_1 (\underline{v}_1 - \underline{v}_{S_1}) \cdot \underline{n}_1 dS = \rho c_{p_1} T_{i-1/2} \underline{v}_{i-1/2} \cdot \underline{n}_1 S \quad (\text{A.5})$$

et

$$\oint_{S_1} \lambda_1 \nabla T_1 \cdot \underline{n}_1 dS = \lambda_1 \nabla T_{i-1/2} \cdot \underline{n}_{i-1/2} S - \underline{q}_1 \cdot \underline{n}_I S. \quad (\text{A.6})$$

La difficulté vient de la disparition et de l'apparition de bouts de cellules. Au moment de la disparition, la température de la cellule se perd, et au contraire, à l'apparition il faut l'attribuer arbitrairement selon les températures des cellules voisines. Une idée pour simplifier ce problème est d'associer la cellule avale au bout de cellule diphasique ($i + 1$ et V_2). Il faut alors dissocier ces deux volumes quand l'interface passe dans la cellule $i + 1$. Cette dissociation peut se faire de manière linéaire et ne semble pas présenter de difficultés. Cette solution peut s'imaginer en 1D, mais n'est plus satisfaisante en dimension supérieure. En effet, il n'est plus évident de savoir dans quelle cellule est passée le bout de cellule diphasique. Cette solution n'a donc pas été implémentée en 1D.

Annexe **B**

Études de l'interpolation de la température et de son gradient à l'interface

Sommaire du présent chapitre

B.1 Interpolation linéaire par morceau à l'ordre n	223
B.2 Interpolation mixte entre l'énergie et les conditions aux limites	225

B.1 Interpolation linéaire par morceau à l'ordre n

La démarche adoptée ici est de déduire la valeur de la température et du flux à l'interface à partir de valeurs monophasiques lointaines. Nous allons faire un développement de Taylor tronqué à l'ordre n en T_I . Ce développement est couplé avec l'égalité des flux thermiques à l'interface pour donner l'équation Éq. (B.1). En évaluant le développement de Taylor en n points à gauche et n points à droite, nous obtenons un système à $2n$ équations et le même nombre d'inconnues (en substituant les gradients de température droit et gauche par le flux normal pondéré par la conductivité thermique). Ainsi nous pouvons résoudre ce système.

$$T_k = T_I + \frac{q_I}{\lambda_k} \Delta x_k + \sum_{i=2}^n \left. \frac{\partial^i T}{\partial x^i} \right|_{I_k} \frac{\Delta x_k^i}{i!} \quad (\text{B.1})$$

Il n'y a pas de problème d'anulation du déterminant car les coefficients du système

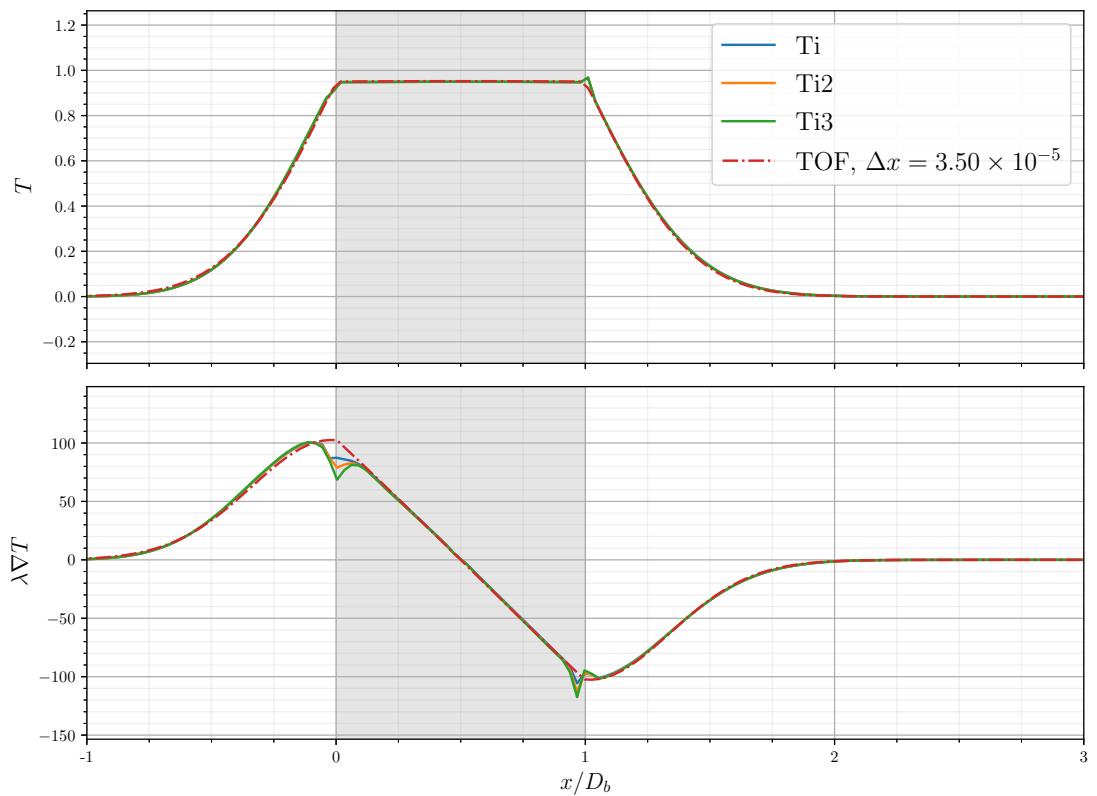


FIGURE B.1 – Comparaison des différents ordres d’interpolation de la température à l’interface.

sont fonctions des distances entre les points. Ceux-ci sont à des distances fixes les uns des autres, il est donc facile de montrer que le déterminant est non-nul (matrice de Vandermonde).

B.2 Interpolation mixte entre l'énergie et les conditions aux limites

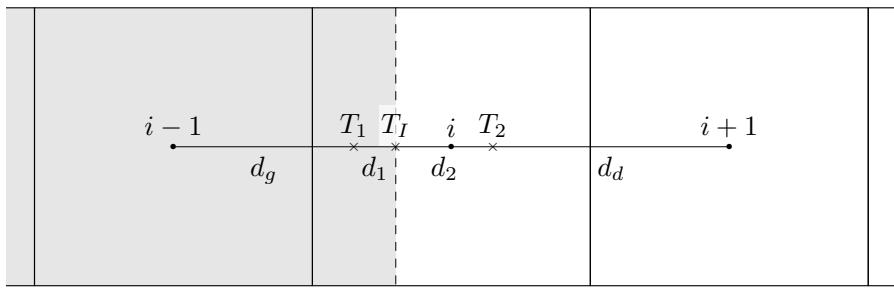


FIGURE B.2 – Schéma des températures dans une cellule diphasique.

En résolvant le problème en température, nous connaissons l'énergie contenue dans la maille diphasique. S'il est impossible de retrouver la valeur de la température d'interface à partir de cette seule information (même en connaissant la position de l'interface), cette information n'est pas décorrélée de celle de la température.

Une méthode envisagée est donc de choisir une approche mixte. Nous considérons la cellule avec pour énergie e , découpée en 2 parties, avec T_1 au centre de la partie gauche et T_2 au centre de la partie droite. Les températures monophasiques des voisins de notre cellule sont notées T_g et T_d pour les voisines respectivement à gauche et à droite. En considérant que la température est une fonction linéaire par morceau dans la cellule, nous pouvons écrire :

$$\rho c_{p1} T_1 \alpha_1 + \rho c_{p2} T_2 \alpha_2 = e \quad (\text{B.2})$$

$$\lambda_1 \frac{T_I - T_1}{d_1} = \lambda_2 \frac{T_2 - T_I}{d_2} \quad (\text{B.3})$$

Et maintenant nous allons écrire les relations d'extrapolation linéaire de la tempé-

226 ANNEXE B. Études de l'interpolation de la température et de son gradient à l'interface

rature des deux côtés (gauche et droite) et les relaxer :

$$T_I = T_1 + \frac{T_1 - T_g}{d_g} d_1 + \epsilon(d_1 + d_g) \quad (\text{B.4})$$

$$T_I = T_2 - \frac{T_d - T_2}{d_d} d_2 + \epsilon(d_2 + d_d) \quad (\text{B.5})$$

Ici l'erreur sur un T_I linéaire est d'autant plus grande que l'interface est éloignée du point considéré, c'est pour cela que ϵ est pondéré par une distance. Il existe dans certains cas une solution analytique pour T_I . La solution peut-être déterminée à l'aide d'un logiciel de calcul formel tel que **Sympy**. Le déterminant du système est de degré 5 en alpha, donc il n'est pas garanti qu'il y ait une solution de manière systématique.

Bibliographie

- [1] D. K. AGARWAL et al. “Planar Simulation of Bubble Growth in Film Boiling in Near-Critical Water Using a Variant of the VOF Method”. In : *Journal of Heat Transfer* 126.3 (juin 2004), p. 329-338. ISSN : 0022-1481. DOI : 10.1115/1.1737779. URL : <https://doi.org/10.1115/1.1737779>.
- [2] Tariq D. ASLAM. “A partial differential equation approach to multidimensional extrapolation”. en. In : *Journal of Computational Physics* 193.1 (jan. 2004), p. 349-355. ISSN : 00219991. DOI : 10.1016/j.jcp.2003.08.001. URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999103004170>.
- [3] E. AULISA et al. “Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional Cartesian geometry”. en. In : *Journal of Computational Physics* 225.2 (août 2007), p. 2301-2319. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2007.03.015. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999107001325>.
- [4] Néstor BALCÁZAR et al. “A finite-volume/level-set method for simulating two-phase flows on unstructured grids”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 64 (2014), p. 55-72.
- [5] A. BARALDI, M. S. DODD et A. FERRANTE. “A mass-conserving volume-of-fluid method : Volume tracking and droplet surface-tension in incompressible isotropic turbulence”. en. In : *Computers & Fluids* 96 (2014), p. 322-337. ISSN : 0045-7930. DOI : 10.1016/j.compfluid.2013.12.018. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793013005100>.
- [6] Philippe BERNE. “Contribution à la modélisation du taux de production de vapeur par autovaporisation dans les écoulements diphasiques en conduite”. français. Thèse de docteur-ingénieur. France : École centrale Paris, 1983.
- [7] G. BOIS et A. du CLUZEAU. “DNS of Turbulent Bubbly Flows in Plane Channels Using the Front-Tracking Algorithm of TrioCFD”. en. In : American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, oct. 2017. DOI :

- 10 . 1115 /FEDSM2017 - 69128. URL : <https://asmedigitalcollection.asme.org/FEDSM/proceedings/FEDSM2017/58066/V01CT16A005/234146>.
- [8] Guillaume BOIS. "Direct numerical simulation of a turbulent bubbly flow in a vertical channel : Towards an improved second-order reynolds stress model". In : *Nuclear Engineering and Design* 321 (2017), p. 92-103.
- [9] Guillaume BOIS. "Transferts de masse et d'énergie aux interfaces liquide/vapeur avec changement de phase : proposition de modélisation aux grandes échelles des interfaces". Thèse de doct. Grenoble, 2011.
- [10] Guillaume BOIS et Antoine du CLUZEAU. "DNS of turbulent bubbly flows in plane channels using the Front-Tracking algorithm of TrioCFD". In : *Fluids engineering division summer meeting*. T. 58066. American Society of Mechanical Engineers. 2017, V01CT16A005.
- [11] Guillaume BOIS et al. "DNS of a turbulent steam/water bubbly flow in a vertical channel". In : *ICMF 2016-International Conference on Multiphase Flow*. 2016.
- [12] Victor BONIOU, Thomas SCHMITT et Aymeric VIÉ. "Comparison of interface capturing methods for the simulation of two-phase flow in a unified low-Mach framework". en. In : *Journal of Computational Physics* (mai 2021), p. 45.
- [13] Patrick BRICARD. "Modélisation de l'ébullition sous-saturée et de la crise d'ébullition par caléfaction en convection forcée". These de doctorat. Châtenay-Malabry, Ecole centrale de Paris, 1995. URL : <https://www.theses.fr/1995ECAP0434> (visité le 19/12/2022).
- [14] M. CARBONE, A. D. BRAGG et M. IOVINO. "Multiscale fluid-particle thermal interaction in isotropic turbulence". en. In : *Journal of Fluid Mechanics* 881 (2019), p. 679-721. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/jfm.2019.773. URL : https://www.cambridge.org/core/product/identifier/S0022112019007730/type/journal_article.
- [15] Mohamed-Amine CHADIL, Stéphane VINCENT et Jean-Luc ESTIVALÈZES. "Gas-Solid Heat Transfer Computation from Particle-Resolved Direct Numerical Simulations". en. In : *Fluids* 7.1 (2022). Number : 1 Publisher : Multidisciplinary Digital Publishing Institute, p. 15. ISSN : 2311-5521. DOI : 10.3390/fluids7010015. URL : <https://www.mdpi.com/2311-5521/7/1/15>.
- [16] M CHANDESRIS et D JAMET. "Boundary conditions at a planar fluid-porous interface for a Poiseuille flow". In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 49.13-14 (2006), p. 2137-2150.

- [17] Paolo CIFANI. “DNS of turbulent bubble-laden channel flows”. English. In : (2017). DOI : 10.3990/1.9789036544160. URL : <https://research.utwente.nl/en/publications/dns-of-turbulent-bubble-laden-channel-flows>.
- [18] A du CLUZEAU, G BOIS et Adrien TOUTANT. “Analysis and modelling of Reynolds stresses in turbulent bubbly up-flows from direct numerical simulations”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 866 (2019), p. 132-168.
- [19] Antoine Du CLUZEAU. “Modélisation physique de la dynamique des écoulements à bulles par remontée d'échelle à partir de simulations fines”. fr. Thèse de doct. Université de Perpignan, 2019. URL : <https://theses.hal.science/tel-02336611>.
- [20] Antoine du CLUZEAU et al. “Analysis and modelling of bubble-induced turbulence from DNS of swarms”. In : *Physical Review Fluids* (2022).
- [21] Sadegh DABIRI et Gretar TRYGGVASON. “Heat transfer in turbulent bubbly flow in vertical channels”. en. In : *Chemical Engineering Science* 122 (jan. 2015), p. 106-113. ISSN : 00092509. DOI : 10.1016/j.ces.2014.09.006. URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009250914005004>.
- [22] Niels G. DEEN et J. A. M. KUIPERS. “Direct numerical simulation of wall-to liquid heat transfer in dispersed gas–liquid two-phase flow using a volume of fluid approach”. en. In : *Chemical Engineering Science* 102 (2013), p. 268-282. ISSN : 0009-2509. DOI : 10.1016/j.ces.2013.08.025. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000925091300568X>.
- [23] O DESJARDINS et V MOUREAU. “Methods for multiphase flows with high density ratio”. en. In : Center for Turbulence Research, 2010, p. 10. URL : https://web.stanford.edu/group/ctr/Summer/SP10/6_02_desjardins.pdf.
- [24] Olivier DESJARDINS, Vincent MOUREAU et Heinz PITSCH. “An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization”. en. In : *Journal of Computational Physics* 227.18 (sept. 2008), p. 8395-8416. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2008.05.027. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999108003112>.
- [25] Olivier DESJARDINS et al. “High order conservative finite difference scheme for variable density low Mach number turbulent flows”. en. In : *Journal of Computational Physics* 227.15 (juil. 2008), p. 7125-7159. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2008.03.027. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999108001666>.

- [26] Hang DING, Peter D.M. SPELT et Chang SHU. “Diffuse interface model for incompressible two-phase flows with large density ratios”. en. In : *Journal of Computational Physics* 226.2 (oct. 2007), p. 2078-2095. ISSN : 00219991. DOI : 10.1016/j.jcp.2007.06.028. URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999107002793>.
- [27] *DNS Database of Wall Turbulence and Heat Transfer at Tokyo University of Science*. URL : <https://www.rs.tus.ac.jp/~t2lab/db/>.
- [28] Wang DONGHONG et al. “A ghost fluid based front tracking method for multimedium compressible flows”. en. In : *Acta Mathematica Scientia* 29.6 (nov. 2009), p. 1629-1646. ISSN : 02529602. DOI : 10.1016/S0252-9602(10)60006-9. URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0252960210600069>.
- [29] Antoine DU CLUZEAU. “Modélisation physique de la dynamique des écoulements à bulles par remontée d'échelle à partir de simulations fines”. Theses. Université de Perpignan, sept. 2019. URL : <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-02336611>.
- [30] Dorian DUPUY, Adrien TOUTANT et Françoise BATAILLE. “Turbulence kinetic energy exchanges in flows with highly variable fluid properties”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 834 (2018), p. 5-54.
- [31] Ronald P FEDKIW et al. “A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method)”. en. In : *Journal of Computational Physics* 152.2 (juil. 1999), p. 457-492. ISSN : 00219991. DOI : 10.1006/jcph.1999.6236. URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999199962368>.
- [32] John E GAFFNEY. “Estimating the number of faults in code”. In : *IEEE Transactions on Software Engineering* 4 (1984), p. 459-464.
- [33] Daniela GARAJEU et Marc MEDALE. “An XFEM model for incompressible two-fluid flows with arbitrary high contrasts in material properties”. Août 2016. URL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01412201>.
- [34] Frédéric GIBOU et al. “A level set based sharp interface method for the multiphase incompressible Navier–Stokes equations with phase change”. en. In : *Journal of Computational Physics* 222.2 (mar. 2007), p. 536-555. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2006.07.035. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999106003652>.

- [35] James GLIMM et al. “Simple front tracking”. en. In : *Contemporary Mathematics*. Sous la dir. de Gui-Qiang CHEN et Emmanuele DiBENEDETTO. T. 238. Providence, Rhode Island : American Mathematical Society, 1999, p. 133-149. ISBN : 978-0-8218-1196-2 978-0-8218-2034-6. URL : <http://www.ams.org/conm/238/>.
- [36] James GLIMM et al. “Three-Dimensional Front Tracking”. en. In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 19.3 (mai 1998), p. 703-727. ISSN : 1064-8275, 1095-7197. DOI : 10.1137/S1064827595293600. URL : <http://pubs.siam.org/doi/10.1137/S1064827595293600>.
- [37] Biljana GVOZDIĆ et al. “Experimental investigation of heat transport in homogeneous bubbly flow”. en. In : *Journal of Fluid Mechanics* 845 (2018). Publisher : Cambridge University Press, p. 226-244. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/jfm.2018.213. URL : <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/experimental-investigation-of-heat-transport-in-homogeneous-bubbly-flow/5B6D0272A7FCDADC3DDFC0B8DBF25D7D> (visité le 01/04/2020).
- [38] Josef HASLBERGER et al. “A direct numerical simulation analysis of coherent structures in bubble-laden channel flows”. en. In : *Journal of Fluid Mechanics* 905 (2020), A37. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/jfm.2020.780. URL : https://www.cambridge.org/core/product/identifier/S0022112020007806/type/journal_article.
- [39] C. W HIRT et B. D NICHOLS. “Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries”. en. In : *Journal of Computational Physics* 39.1 (jan. 1981), p. 201-225. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/0021-9991(81)90145-5. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999181901455>.
- [40] Satoshi II et al. “An interface capturing method with a continuous function : The THINC method with multi-dimensional reconstruction”. en. In : *Journal of Computational Physics* 231.5 (2012), p. 2328-2358. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2011.11.038. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999111006942>.
- [41] Alessio INNOCENTI et al. “Direct numerical simulation of bubble-induced turbulence”. en. In : *Journal of Fluid Mechanics* 918 (2021). Publisher : Cambridge University Press, A23. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/jfm.2021.288. URL : <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/direct-numerical-simulation-of-bubbleinduced-turbulence/73A7047883459446AF97566BD297E8C9>.

- [42] Mamoru ISHII et Takashi HIBIKI. *Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow*. en. New York, NY : Springer New York, 2011. ISBN : 978-1-4419-7984-1 978-1-4419-7985-8. DOI : 10.1007/978-1-4419-7985-8. URL : <http://link.springer.com/10.1007/978-1-4419-7985-8>.
- [43] N. KASAGI, Y. TOMITA et A. KURODA. “Direct Numerical Simulation of Passive Scalar Field in a Turbulent Channel Flow”. In : *Journal of Heat Transfer* 114.3 (1992), p. 598-606. ISSN : 0022-1481. DOI : 10.1115/1.2911323. URL : <https://doi.org/10.1115/1.2911323>.
- [44] I. KATAOKA. “Local instant formulation of two-phase flow”. en. In : *International Journal of Multiphase Flow* 12.5 (sept. 1986), p. 745-758. ISSN : 0301-9322. DOI : 10.1016/0301-9322(86)90049-2. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0301932286900492>.
- [45] Hiroshi KAWAMURA, Hiroyuki ABE et Yuichi MATSUO. “DNS of turbulent heat transfer in channel flow with respect to Reynolds and Prandtl number effects”. In : *International Journal of Heat and Fluid Flow* 20.3 (1999), p. 196-207.
- [46] Hiroshi KAWAMURA, Hiroyuki ABE et Yuichi MATSUO. “DNS of turbulent heat transfer in channel flow with respect to Reynolds and Prandtl number effects”. en. In : *International Journal of Heat and Fluid Flow* 20.3 (1999), p. 196-207.
- [47] Takafumi KAWAMURA et Yoshiaki KODAMA. “Numerical simulation method to resolve interactions between bubbles and turbulence”. en. In : *International Journal of Heat and Fluid Flow* 23.5 (2002), p. 627-638. ISSN : 0142727X. DOI : 10.1016/S0142-727X(02)00158-3. URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0142727X02001583>.
- [48] D. LAKEHAL et al. “Direct Numerical Simulation of Turbulent Heat Transfer Across a Mobile, Sheared Gas-Liquid Interface”. In : *Journal of Heat Transfer* 125.6 (2003), p. 1129-1139. ISSN : 0022-1481. DOI : 10.1115/1.1621891. URL : <https://doi.org/10.1115/1.1621891>.
- [49] Dominique LEGENDRE et Jacques MAGNAUDET. “The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 368 (1998), p. 81-126.
- [50] B. P. LEONARD. “A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation”. en. In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 19.1 (juin 1979), p. 59-98. ISSN : 0045-7825. DOI : 10.1016/0045-7825(79)90034-3. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782579900343>.

- [51] Chuan LI et al. "Alternating direction ghost-fluid methods for solving the heat equation with interfaces". en. In : *Computers & Mathematics with Applications* 80.5 (sept. 2020), p. 714-732. ISSN : 08981221. DOI : 10.1016/j.camwa.2020.04.027. URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0898122120301747>.
- [52] Xu-Dong LIU, Stanley OSHER et Tony CHAN. "Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes". en. In : *Journal of Computational Physics* 115.1 (nov. 1994), p. 200-212. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1006/jcph.1994.1187. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999184711879>.
- [53] Jiacai LU et Gretar TRYGGVASON. "Numerical study of turbulent bubbly downflows in a vertical channel". In : *Physics of Fluids* 18.10 (2006). Publisher : American Institute of Physics, p. 103302. ISSN : 1070-6631. DOI : 10.1063/1.2353399. URL : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.2353399>.
- [54] Stephen L. LYONS, Thomas J. HANRATTY et John B. McLAUGHLIN. "Large-scale computer simulation of fully developed turbulent channel flow with heat transfer". en. In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 13.8 (1991), p. 999-1028. ISSN : 1097-0363. DOI : 10.1002/fld.1650130805. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/fld.1650130805>.
- [55] Chen MA et Dieter BOTHE. "Direct numerical simulation of thermocapillary flow based on the Volume of Fluid method". en. In : *International Journal of Multiphase Flow* 37.9 (2011), p. 1045-1058. ISSN : 0301-9322. DOI : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2011.06.005. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932211001273>.
- [56] Chen MA et Dieter BOTHE. "Direct numerical simulation of thermocapillary flow based on the volume of fluid method". In : *International Journal of Multiphase Flow* 37.9 (2011), p. 1045-1058.
- [57] L. C. MALAN et al. "A geometric VOF method for interface resolved phase change and conservative thermal energy advection". en. In : *Journal of Computational Physics* 426 (fév. 2021), p. 109920. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2020.109920. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199912030694X>.
- [58] Etienne MANON. "Contribution à l'analyse et à la modélisation locale des écoulements bouillants sous-saturés dans les conditions des réacteurs à eau sous pression". français. Thèse de doctorat. France : École centrale Paris, 2000.

- [59] J. MASSONI et al. “Proposition de méthodes et modèles eulériens pour les problèmes à interfaces entre fluides compressibles en présence de transfert de chaleur : Some models and Eulerian methods for interface problems between compressible fluids with heat transfer”. fr. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 45.6 (mar. 2002), p. 1287-1307. ISSN : 0017-9310. DOI : 10.1016/S0017-9310(01)00238-1. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931001002381>.
- [60] Benoît MATHIEU. “Etudes physique, expérimentale et numérique des mécanismes de base intervenant dans les écoulements diphasiques en microfluidique”. 2003.
- [61] Efstathios MICHAELIDES. *Particles, bubbles & drops : their motion, heat and mass transfer*. World Scientific, 2006.
- [62] Christophe MOREL. *Mathematical Modeling of Disperse Two-Phase Flows*. en. T. 114. Fluid Mechanics and Its Applications. Cham : Springer International Publishing, 2015. ISBN : 978-3-319-20103-0 978-3-319-20104-7. DOI : 10.1007/978-3-319-20104-7. URL : <http://link.springer.com/10.1007/978-3-319-20104-7>.
- [63] S NAS, M MURADOGLU et G TRYGGVASON. “Pattern formation of drops in thermocapillary migration”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 49.13-14 (2006), p. 2265-2276.
- [64] S NAS et G TRYGGVASON. “Thermocapillary interaction of two bubbles or drops”. In : *International journal of multiphase flow* 29.7 (2003), p. 1117-1135.
- [65] Hassan NEMATI et al. “Direct numerical simulation of turbulent bubbly down flow using an efficient CLSVOF method”. en. In : *International Journal of Multiphase Flow* 135 (2021), p. 103500. ISSN : 0301-9322. DOI : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2020.103500. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030193222030611X>.
- [66] Elin OLSSON et Gunilla KREISS. “A conservative level set method for two phase flow”. In : *Journal of Computational Physics* 210.1 (2005), p. 225-246.
- [67] Elin OLSSON, Gunilla KREISS et Sara ZAHEDI. “A conservative level set method for two phase flow II”. In : *Journal of Computational Physics* 225.1 (2007), p. 785-807.
- [68] John PALMORE et Olivier DESJARDINS. “A volume of fluid framework for interface-resolved simulations of vaporizing liquid-gas flows”. en. In : *Journal of Computational Physics* 399 (déc. 2019), p. 108954. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2019.108954. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199911930659X>.

- [69] Aniruddha PANDA et al. “Influence of Gas Fraction on Wall-to-Liquid Heat Transfer in Dense Bubbly Flows”. In : *Chemical Engineering Science : X* 4 (sept. 2019), p. 100037. DOI : 10.1016/j.cesx.2019.100037.
- [70] Suhas V. PATANKAR. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. en. Hemisphere Publishing Corporation, 1980. ISBN : 978-0-07-048740-6.
- [71] S. PIEDRA et al. “Numerical study of the flow and heat transfer of bubbly flows in inclined channels”. en. In : *International Journal of Heat and Fluid Flow* 56 (2015), p. 43-50. ISSN : 0142-727X. DOI : 10.1016/j.ijheatfluidflow.2015.07.001. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142727X15000831>.
- [72] Stéphane POPINET. “An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows”. en. In : *Journal of Computational Physics* 228.16 (2009), p. 5838-5866. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2009.04.042. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910900240X>.
- [73] Andrea PROSPERETTI et Gretar TRYGGVASON. “Computational methods for multiphase flow”. en. In : (2009), p. 484.
- [74] Elbridge Gerry PUCKETT et al. “A high-order projection method for tracking fluid interfaces in variable density incompressible flows”. In : *Journal of computational physics* 130.2 (1997), p. 269-282.
- [75] WE RANZ et WR MARSHALL JR. “Part II, Evaporation from Drops”. In : *Chemical Eng. Progress* 48 (1952), p. 173-180.
- [76] Lewis Fry RICHARDSON. “The approximate arithmetical solution by finite differences with an application to stresses in masonry dams”. In : *Philosophical Transactions of the Royal Society of America* 210 (1911), p. 307-357.
- [77] E RUCKENSTEIN. “On heat transfer between vapour bubbles in motion and the boiling liquid from which they are generated”. In : *Chemical Engineering Science* 10.1-2 (1959), p. 22-30.
- [78] Ruben SCARDOVELLI et Stephane ZALESKI. “Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian–Lagrangian advection”. en. In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 41.3 (2003), p. 251-274. ISSN : 1097-0363. DOI : 10.1002/fld.431. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/fld.431>.
- [79] M. van SINT ANNALAND, N. G. DEEN et J. A. M. KUIPERS. “Numerical simulation of gas bubbles behaviour using a three-dimensional volume of fluid method”. en. In : *Chemical Engineering Science* 60.11 (2005), p. 2999-3011. ISSN : 0009-2509. DOI : 10.1016/j.ces.2005.01.031. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250905000564>.

- [80] Aymeric SONOLET. *Flu1dDyn*. original-date : 2022-04-18T08:57:29Z. Mai 2022. URL : <https://github.com/cea-trust-platform/FluidDyn>.
- [81] M. SUSSMAN et al. “A sharp interface method for incompressible two-phase flows”. en. In : *Journal of Computational Physics* 221.2 (fév. 2007), p. 469-505. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2006.06.020. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999106002981>.
- [82] Nafiseh TALEBANFARD, Hassan NEMATI et Bendiks Jan BOERSMA. “Heat transfer in deforming droplets with a direct solver for a coupled level-set and volume of fluid method”. en. In : *International Communications in Heat and Mass Transfer* 108 (2019), p. 104272. ISSN : 0735-1933. DOI : 10.1016/j.icheatmasstransfer.2019.104272. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0735193319301307>.
- [83] Mitsuru TANAKA. *Numerical Study on Flow Structures and Heat Transfer Characteristics of Turbulent Bubbly Upflow in a Vertical Channel*. en. Sous la dir. de Jianping ZHU. Journal Abbreviation : Computational Simulations and Applications. InTech, 2011. ISBN : 978-953-307-430-6. DOI : 10.5772/24405. URL : <http://www.intechopen.com/books/computational-simulations-and-applications/numerical-study-on-flow-structures-and-heat-transfer-characteristics-of-turbulent-bubbly-upflow-in-a>.
- [84] Sébastien TANGUY, Thibaut MÉNARD et Alain BERLEMONT. “A Level Set Method for vaporizing two-phase flows”. en. In : *Journal of Computational Physics* 221.2 (fév. 2007), p. 837-853. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2006.07.003. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999106003214>.
- [85] Sébastien TANGUY et al. “Benchmarks and numerical methods for the simulation of boiling flows”. en. In : *Journal of Computational Physics* 264 (mai 2014), p. 1-22. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2014.01.014. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999114000412>.
- [86] Sébastien TANGUY et al. “Développement d’une méthode level set pour le suivi d’interfaces et applications”. fr. In : *LA HOUILLE BLANCHE* 2 (2006), p. 9.
- [87] Hiroshi TERASHIMA et Grétar TRYGGVASON. “A front-tracking/ghost-fluid method for fluid interfaces in compressible flows”. en. In : *Journal of Computational Physics* 228.11 (juin 2009), p. 4012-4037. ISSN : 00219991. DOI : 10.1016/j.jcp.2009.02.023. URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999109000898>.

- [88] Elhadji I. THIAM et al. “Particle-resolved numerical simulations of the gas–solid heat transfer in arrays of random motionless particles”. en. In : *Acta Mechanica* 230.2 (2019). tex.ids : thiamParticleresolvedNumericalSimulations2019a, p. 541-567. ISSN : 1619-6937. DOI : 10.1007/s00707-018-2346-5. URL : <https://doi.org/10.1007/s00707-018-2346-5>.
- [89] Elhadji Ibrahima THIAM. “Modélisation et simulation numérique directe des transferts de chaleur dans les écoulements fortement chargés en particules”. These de doctorat. Toulouse 3, 2018. URL : <https://www.theses.fr/2018TOU30086>.
- [90] A. TOUTANT et al. “Jump conditions for filtered quantities at an under-resolved discontinuous interface. Part 1 : Theoretical development”. en. In : *International Journal of Multiphase Flow* 35.12 (déc. 2009), p. 1100-1118. ISSN : 0301-9322. DOI : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2009.07.009. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030193220900130X>.
- [91] Adrien TOUTANT, B MATHIEU et O LEBAIGUE. “Volume-conserving mesh smoothing for front-tracking methods”. In : *Computers & fluids* 67 (2012), p. 16-25.
- [92] Adrien TOUTANT et al. “Jump conditions for filtered quantities at an under-resolved discontinuous interface. Part 1 : Theoretical development”. In : *International journal of Multiphase flow* 35.12 (2009), p. 1100-1118.
- [93] Adrien TOUTANT et al. “Jump conditions for filtered quantities at an under-resolved discontinuous interface. Part 2 : A priori tests”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 35.12 (2009), p. 1119-1129.
- [94] A TOUTANT et al. “DNS of the interaction between a deformable buoyant bubble and a spatially decaying turbulence : a priori tests for LES two-phase flow modelling”. In : *Computers & Fluids* 37.7 (2008), p. 877-886.
- [95] *TrioCFD*. original-date : 2021-09-16T13:09:01Z. Mai 2022. URL : <https://github.com/cea-trust-platform/TrioCFD-code>.
- [96] G. TRYGGVASON et al. “A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow”. en. In : *Journal of Computational Physics* 169.2 (mai 2001), p. 708-759. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1006/jcph.2001.6726. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999101967269>.
- [97] Gretar TRYGGVASON, Ruben SCARDOVELLI et S. ZALESKI. *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge ; New York : Cambridge University Press, 2011. ISBN : 978-0-521-78240-1.

- [98] Salih Ozen UNVERDI et Grétar TRYGGVASON. “A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows”. In : *Journal of computational physics* 100.1 (1992), p. 25-37.
- [99] Geoffroy VAUDOR et al. “A Consistent Mass and Momentum Flux Computation Method Using Rudman-Type Technique With a CLSVOF Solver”. en. In : American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, déc. 2014. DOI : 10.1115/FEDSM2014-21802. URL : <https://asmedigitalcollection.asme.org/FEDSM/proceedings/FEDSM2014/46230/V01CT23A012/233016>.
- [100] J. H WILLIAMSON. “Low-storage Runge-Kutta schemes”. en. In : *Journal of Computational Physics* 35.1 (mar. 1980), p. 48-56. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/0021-9991(80)90033-9. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999180900339>.
- [101] D. L. YOUNGS. “Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion”. In : *Numerical Methods for Fluid Dynamics* 24 (1982). Publisher : Academic Press, p. 273-285. URL : <https://ci.nii.ac.jp/naid/10029507464/>.
- [102] Y.-T. ZHANG et C.-W. SHU. “ENO and WENO Schemes”. en. In : *Handbook of Numerical Analysis*. T. 17. Elsevier, 2016, p. 103-122. ISBN : 978-0-444-63789-5. URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1570865916300187>.
- [103] Shuo ZHAO, Jie ZHANG et Ming-Jiu NI. “Boiling and evaporation model for liquid-gas flows : A sharp and conservative method based on the geometrical VOF approach”. en. In : *Journal of Computational Physics* (déc. 2021), p. 110908. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2021.110908. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999121008032>.

Table des figures

1	Différents régimes d'ébullition selon le taux de vide. Les écoulements à bulles se situent avant l'apparition de la crise. Image tirée de [29].	9
2	Remontée d'échelle. La simulation la plus à gauche est réalisée avec TrioCFD-IJK et représente la turbulence aux échelles fines, la simulation au centre est faite à l'aide de NeptuneCFD et est le résultat d'une simulation dans le cadre Euler-Euler, et enfin à droite se trouve une simulation Cathare qui modélise le comportement d'une centrale nucléaire à l'échelle système. Image tirée de [29].	11
1.1	Illustration des différentes stratégies de maillage pour la simulation d'écoulements diphasiques avec interface.	23
1.2	Représentation du suivi d'interface par maillage Lagrangien dans une représentation volumique Eulérienne. Localisation des champs sur le maillage Eulérien. La vitesse est aux triangles sur les faces, la pression, l'indicatrice de phase et la température aux cercles au centre des cellules. Les conditions limites sont imposées aux faces des cellules sous la forme de flux. Tiré de BOIS [9].	29
1.3	Schéma d'un canal 1.3a et d'un essaim 1.3b, tiré de DU CLUZEAU [29].	30
1.4	Répartition initiales des bulles dans un essaim. Représentation du maillage Eulérien en vert, des bulles en rouges et des bulles fantômes pour la gestion de la périodicité en bleu/gris. Tiré de [29].	32
1.5	Évaluation de l'opérateur de convection, dans un cas sans diffusion.	37
1.6	Évaluation de l'opérateur de diffusion, dans un cas sans convection.	38
2.1	Conditions aux limites dans le cas du canal, tiré de [45].	42
2.2	Profil de vitesse moyenne axiale dans le canal plan.	51
2.3	Profil de la moyenne du carré des fluctuations de vitesses.	52
2.4	Profil de la moyenne du produit des fluctuations de la vitesse axiale et normale aux parois.	53
2.5	Température dans le canal de Kawamura, vue perpendiculaire aux parois et au sens de l'écoulement.	53

2.6 Profil proche paroi de \bar{T}^+ comparé à la simulation de Kawamura.	54
2.7 Convergence en maillage du profil de température selon l'axe normal aux parois en échelle logarithmique.	55
2.8 Profil des statistiques du produit des fluctuations vitesse température. .	56
2.9 Bilan des fluctuations $\bar{v'}\bar{T}'$ pour le maillage le plus fin.	56
2.10 Évolution au cours du temps physique du nombre de Nusselt. En pointillée les limites temporelle de début et de fin de prise de statistiques.	58
2.11 Transferts thermiques en écoulement diphasique en canal à bulle (les bulles sur la droite qui dépassent du champ thermique sont dans un domaine étendu périodique, elles sont dupliquées dans la partie du champ qui apparaît vide à gauche, et interragissent avec le champ, mais ne sont pas représentées ici).	59
2.12 Taux de vide dans le profil du canal.	61
2.13 Profil de vitesse liquide dans le canal en échelle logarithmique, loi linéaire en paroi et logarithmique au cœur du canal.	62
2.14 Fluctuations moyennes de vitesse liquide diagonales.	63
2.15 Fluctuation moyenne du produit $\bar{u'}^+\bar{v'}^+$	63
2.16 Profil de température, adimensionné par T_τ	64
2.17 Coefficient de la loi logarithmique en fonction du nombre de Prandtl. .	65
2.18 Moyenne des fluctuations vitesse-température $\bar{u'}^+\bar{T'}^+$	66
2.19 Modèle SGDH pour $\bar{v'}^+\bar{T'}^+$	67
2.20 Nombre de Prandtl turbulent en fonction du nombre de Prandtl liquide.	68
2.21 Nombre de Nusselt en fonction du nombre de Prandtl liquide.	69
 3.1 Schéma des bulles dans le domaine de simulation.	72
3.2 Evolution du temps de calcul par pas de temps en fonction de la taille du calcul (nombre de mailles par cœur et nombre total de coeurs).	79
3.3 Nombre de Reynolds en fonction du temps pour les différents maillages.	80
3.4 Evolution des températures par phase pour les différents maillages pour le champ thermique à $Pr_l = 0,71$	81
3.5 Evolution du nombre de Nusselt au cours du temps pour $Pr_l = 0,71$ pour les différents maillages.	81
3.6 Convergence du nombre de Nusselt en fonction de h pour une simulation à un nombre de Prandtl de 0,71.	82
3.7 Écart relatif entre le nombre de Nusselt moyen mesuré et le nombre de Nusselt limite quand $h = 0$	83
3.8 Répartition de la température dans un essaim de bulles	84

3.9 Températures moyenne de la phase vapeur, de la phase liquide, et de l'interface au cours du temps pour la simulation à nombre de Prandtl liquide de 0,71	85
3.10 Superposition des courbes d'évolution de la température pour des simulations à différentes propriétés thermiques à $\text{Pr}_l = 0,50$	86
3.11 Évolution au cours du temps de ΔT la différence entre la température moyenne de la vapeur et du liquide pour différents nombres de Prandtl.	87
3.12 Évolution de la température moyenne du liquide en fonction de la différence moyenne de température pour différents nombres de Prandtl.	89
3.13 Évolution du nombre de Nusselt en fonction du temps pour différents nombres de Prandtl.	90
3.14 Comparaison des nombres de Nusselt en fonction du nombre de Prandtl de la simulation, obtenus avec la méthode par moyenne temporelle et par régression linéaire de $\log \Delta T = f(t)$	91
3.15 Comparaison des différents modèles de l'évolution du nombre de Nusselt en fonction du nombre de Péclet en échelle logarithmique pour une simulation à un nombre de Reynolds de 521.	93
3.16 Évolution au cours du temps de l'écart entre la température liquide moyenne et la température moyenne à l'interface pour des simulations à différents nombres de Prandtl.	94
3.17 Comparaison des différents modèles de l'évolution du nombre de Nusselt en fonction du nombre de Prandtl en échelle logarithmique pour une simulation à un nombre de Reynolds de 521. Régression logarithmique pour $\text{Pr}_l \leq 1,00$	95
3.18 Extrapolation de type Richardson pour estimer une courbe du nombre de Nusselt liquide en fonction du nombre de Prandtl à pas d'espace nul à $Re = 521$	97
3.19 Modélisation en loi puissance pour les différents maillages et l'interpolation à pas d'espace nul. En trait plein la partie exponentielle, en pointillés la partie affine. La hauteur des croix représente 2 écarts-types des variations temporelles.	98
3.20 Corrélation de l'évolution du nombre de Nusselt liquide en fonction du nombre de Prandtl à partir des données interpolées à un pas d'espace nul, comparaison aux corrélations principales de la littérature.	99
3.21 Évolution du nombre de Reynolds au cours du temps pour les quatre nombres de Reynolds simulés sur le maillage le plus fin. L'incertitude représente deux écarts-types.	100

3.22	Nombre de Nusselt en fonction du nombre de Prandtl pour différents nombres de Reynolds simulés. La hauteur des croix matérialise les deux écarts-types de variabilité temporelle.	101
3.23	Nombre de Nusselt mesuré en fonction du nombre de Péclet de la simulation, comparé aux prédictions du modèle de Michaelides. La taille des croix, en largeur et hauteur représente deux écarts types de la variabilité en temps de la valeur.	103
4.1	Schéma du domaine 1D avec maillage cartésien et front-tracking de l'interface d'une bulle tel qu'il est implémenté dans FluidDyn . . .	108
4.2	Schéma de l'instanciation d'un <code>StateProblem</code> à partir de la définition du problème à résoudre.	110
4.3	Schéma de l'instanciation d'un <code>TimeProblem</code> à partir du schéma en temps choisi et de l'équation d'état définie avec sa discréétisation. . .	111
4.4	Schéma simplifié des différentes formulations implémentées. En clair les classes abstraites et en foncé leurs dérivées concrètes.	114
4.5	Classes d'interpolation à l'interface de la température et des flux aux faces à proximité.	115
4.6	Schéma de calcul de la température et des gradients à l'interface. .	116
4.7	Ordre de convergence des différents schémas d'interpolation pour le cas d'un sinus.	120
4.8	Ordre de convergence des différents schémas d'interpolation pour le cas d'un créneau.	120
4.9	Ordre de convergence pour la convection d'un sinus.	122
4.10	Profils des solutions et erreurs obtenues pour la convection d'un sinus.	122
4.11	Ordre de convergence pour la convection d'un créneau.	123
4.12	Profils des solutions et erreurs obtenues pour la convection d'un créneau.	123
4.13	Ordre de convergence de l'opérateur de gradient utilisé pour le calcul de la diffusion.	125
4.14	Profil de température et de l'erreur obtenue dans une simulation de la diffusion d'un sinus.	125
4.15	Ordre de convergence des schémas en temps sans convection ni diffusion, avec un terme source.	126
4.16	Profil de la solution et erreur de la résolution d'un cas avec terme source.	127
4.17	Solution en température pour le cas sans sauvegarde ni reprise et pour le cas repris après une sauvegarde à mi-temps.	128
4.18	Convergence du nombre de Nusselt calculé à partir de la solution en série de Fourier pour différents n_t	131

4.19	Convergence du nombre de Nusselt calculé à partir de la solution en série de Fourier pour différents n_k	131
4.20	Convergence du nombre de Nusselt calculé à partir de la solution en série de Fourier pour différents n_n	132
4.21	Profils de température obtenus dans une simulation complète, sans saut de propriété entre les deux phase.	133
4.22	Évolution de la température de chaque phase au cours du temps dans une simulation sans saut de propriété.	133
4.23	Nombre de Nusselt mesuré dans une simulation sans saut de propriété.	134
4.24	Étude de sensibilité de la perte d'énergie en fonction du pas de temps. Profil d'un échelon de température convecté et diffusé.	137
4.25	Convergence en temps, perte d'énergie en fonction du pas de temps.	137
4.26	Profil de température selon la vitesse au bout de 1s.	139
4.27	Évolution de l'énergie dans le volume selon la vitesse.	139
4.28	Perte d'énergie en fonction de la vitesse constante de convection.	140
4.29	Évolution de l'énergie en fonction de la distance parcourue par la bulle.	140
4.30	Heatmap de la perte relative d'énergie selon les rapports de ρc_p et de λ au bout de 0,20 s.	142
4.31	Profils de température pour $\rho c_{pl}/\rho c_{pv} = 0.1$ au bout de 0,20 s.	143
4.32	Profils de température pour $\lambda_l/\lambda_v = 0.00355$ au bout de 0,20 s.	144
4.33	Profils de température pour $\rho c_{pl}/\rho c_{pv} = 0.1$ et $\lambda_l/\lambda_v = 0.00355$ au bout de 0,20 s.	145
4.34	Perte d'énergie en fonction de κ au bout de 0,20 s.	145
5.1	Steps necessary to get a coherent formulation	151
5.2	Lagrangian mesh over the bubble and slices of the Eulerian mesh, coloured respectively by the curvature and integrated phase indicator function.	153
5.3	Study of the impact of the use of arithmetic or harmonic means for $1/\rho c_p$ and λ . $\tilde{r} = r/D_b$ is the non-dimensional radius and Θ is the non-dimensional temperature. The temperature profiles are represented at different simulation times (s) both using TrioCFD-IJK and the semi-analytical solution (1D-FD presented by Panda et al. [69]).	161
5.4	Phase temperature and Nusselt number evolution in a homogeneous bubbly flow as a function of time.	164
5.5	Energy loss in the homogeneous bubbly flow as a function of time. The simulation uses a RK3 time scheme and a QUICK interpolation.	165

5.6	Energy loss as a function of time in the equivalent 1D configuration. The simulation uses a RK3 time scheme and QUICK interpolation, as the 3D simulation.	166
5.7	Temperature profile at $t = 0.4\text{s}$ for the 1D simulation compared to the semi-analytical reference. The simulation uses a RK3 time scheme and QUICK interpolation, as the 3D simulation.	167
5.8	Comparison of the different convection schemes: effects on the energy.	168
5.9	Comparison of the different convection schemes after a simulation time of 0.4s using an Euler time scheme.	169
5.10	Convergence of the simulation with convection and diffusion, with decreasing Δx and $t_{tot} = 0.1\text{s}$ and $\Delta t = 1,02 \times 10^{-6}\text{s}$, the Euler time scheme and a QUICK interpolation are used.	170
5.11	Scheme of a cell illustrating the known values from which other values are interpolated.	171
5.12	Interpolation scheme for the temperature and the heat flux at the interface.	173
5.13	Values used for the interpolation of the temperature near the inter- face in one dimension with the fluid velocity positive from left to right. The green values are used to interpolate the red values. . . .	175
5.14	Scheme of a cell illustrating the volume tracking of each phase in a conservative approach.	177
5.15	Energy evolution with different temperature formulations.	178
5.16	Final temperature and diffusion flux (at $t = 2\text{s}$) with different tem- perature formulations. The fluid goes from left to right and the do- main is actually much larger. An Euler time scheme and a QUICK interpolation (except at the interface vicinity) are used.	179
5.17	Energy evolution with different energy formulations.	185
5.18	Final temperature and diffusion flux (at $t = 2\text{s}$) with different en- ergy formulations.	186
5.19	L^2 error compared to a non-convected reference solution.	187
6.1	Schéma des différents types de face selon la position de l'interface. En gris fin les faces loin de l'interface, en bleu foncé les faces dont le stencil d'interpolation QUICK contient une cellule diphasique et en rouge les faces coupées par l'interface.	192
6.2	Profil de température obtenu avec la formulation ESP sans la correc- tion des flux convectif et diffusif des faces qui ne sont pas diphasiques.	193
6.3	Comparaison des profils de température après $0,05\text{s}$ avec l'intégra- tion exacte de surface mouillées au cours du temps lors du franchis- sement des faces par l'interface, et en utilisant la méthode Cranck- Nicolson.	194

6.4	Schéma des notations utilisées pour le calcul des températures ghost dans des cellules en une dimension	195
6.5	Comparaison des résultats obtenus en ayant recours à un flux convectif calculé à partir d'une température ghost, sans utiliser directement la température interpolée à l'interface.	196
6.6	Comparaison des profils de température après 0,05 s de simulation sans la correction du flux diffusif.	197
6.7	Comparaison de la solution obtenue avec la formulation ESP et la formulation adaptée pour un cas 3D.	199
6.8	Schéma d'une cellule traversée par une bulle pleine en coupe, visualisation de la surface mouillée par la bulle sur une face de la cellule et de son barycentre.	200
6.9	Schéma d'interpolation de la température à l'interface.	202
6.10	Schéma des cellules considérées pour l'interpolation monophasique proche de l'interface. En bleu le point I où l'interpolation est réalisée. Ce point se situe dans la cellule centrale.	203
6.11	Distance minimum d'interpolation dans le pire des cas. Les points verts représentent les centres des cellules dont la température est utilisée pour l'interpolation.	204
6.12	Schéma d'interpolation de la température monophasique aux barycentres des faces mouillées G_L et G_V	205
6.13	Situation où le choix entre les cellules gauches et droites n'est pas souhaitable. Les points d'interpolation rouges sont loin de l'interface, et dans des directions différentes. Les points d'interpolations verts sont proches de l'interface, mais aussi dans des directions différentes.	206
6.14	Schéma d'interpolation de la température aux cellules ghost.	207
6.15	Schéma des différents types de faces différenciés pour la correction des flux convectifs. En rouge la face est diphasique, en vert elle est monophasique mais immédiatement en aval d'une cellule diphasique, et en bleu elle est monophasique, dans le stencil du schéma QUICK, mais pas immédiatement en aval de l'interface.	208
6.16	Coupe de l'interpolation de la température à l'interface avec une rampe de température en x et des propriétés constantes dans le domaine.	210
6.17	Interpolation de la température à l'interface avec une température constante par phase et une conductivité thermique dans la vapeur 100 fois plus grande que dans le liquide.	211
6.18	Fraction de la surface de la vapeur par face orientée dans la direction x	212

6.19 Composante dans la direction y de la position du barycentre de la fraction de face vapeur de chaque face diphasique orientée dans la direction x (0 si la face est monophasique).	213
A.1 Variables dans une cellule diphasique dans le cadre du couplage des équations d'énergie et de température.	220
A.2 Profil de température après 2 pas de temps de simulation avec la formulation Énergie-Température.	221
B.1 Comparaison des différents ordres d'interpolation de la température à l'interface.	224
B.2 Schéma des températures dans une cellule diphasique.	225

Liste des tableaux

2.1	Paramètres dynamiques utilisés pour les simulations en canal monophasique.	50
2.2	Maillages mis en place pour la convergence en maillage.	50
2.3	Maillage utilisé pour la simulation du canal de bulles.	57
2.4	Paramètres dynamiques utilisés pour les simulations en canal à bulles.	59
2.5	Nombres adimensionnés de l'écoulement pour les simulations en canal à bulles. Le nombre de Reynolds est un résultat relevé sur la simulation, basé sur la mesure du frottement pariétal.	60
2.6	Paramètres thermiques utilisés pour les simulations en canal à bulles.	60
2.7	Nombres de Prandtl associés aux capacités thermiques massique des champs thermiques simulés.	61
3.1	Valeurs géométriques de la simulation.	76
3.2	Paramètres dynamiques utilisés pour les différentes simulations selon le nombre de Reynolds visé.	77
3.3	Paramètres dynamiques utilisés pour toutes les différentes simulations.	77
3.4	Paramètres thermiques utilisés pour les différents champs thermiques.	78
3.5	Description des 4 maillages et des coûts de calcul associés (performance observée sur Occigen).	78
3.6	Paramètres thermiques utilisés pour la validation de l'invariance par adimensionnement.	86
3.7	Corrélations du nombre de Nusselt pour des particules ou des gouttes dans la littérature.	92
4.1	Paramètres physiques utilisés dans les simulations monophasiques .	129
4.2	Paramètres numériques utilisés dans ces simulations monophasiques	129
4.3	Paramètres physiques utilisés par défaut dans chaque simulation ..	135
4.4	Paramètres numériques utilisés par défaut dans chaque simulation ..	135
4.5	Paramètres numériques utilisés pour la référence (sans convection) ..	136
4.6	Vitesses utilisées pour l'étude de l'influence de la convection sur la perte d'énergie ..	138

4.7	Grille des rapports de conductivité et de capacité utilisés. Le cercle représente les rapports visés.	142
4.8	Valeurs de diffusivité thermique $\kappa_l = \lambda_l/\rho c_{pl}$ utilisées.	144
5.1	Physical parameters	162
5.2	Dimensionless quantities	163
5.3	Numerical values	163
5.4	Numerical values used in the 1D simulation aimed to reproduce the energy loss observed in a 3D homogeneous bubbly flow.	166
5.5	Panel of methods used. In this table f refers to an arbitrary inter- polation function, and thus $f(Y)$ is an interpolation using Y values taken from several cells. TOF: temperature one-fluid, EOFm: en- ergy one-fluid modified, TSP: temperature with single-phase fluxes, ESP: energy with single-phase fluxes, TSV: temperature separated volume integral.	172
6.1	Nomenclature de la mise en place des différentes méthodes de dis- cretisation à proximité de l'interface.	191
6.2	Paramètres numériques utilisés dans la validation des modifications étudiées pour le passage au 3D.	191