



N° d'ordre NNT : 2018LYSEC016

THÈSE de DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE LYON
opérée au sein de l'École Centrale de Lyon

École Doctorale N° 162
Mécanique Énergétique Génie Civil Acoustique

Spécialité de doctorat : Mécanique des fluides

Soutenue publiquement le 06/07/2018, par
Marion Capuano

**Simulations numériques d'écoulements
diphasiques compressibles, visqueux et
conductifs à l'aide de schémas aux différences
finies centrées d'ordre élevé**

Devant le jury composé de :

Abgrall, Rémi	Professor	Univ. of Zurich	Rapporteur
Bogey, Christophe	Directeur de recherche	École Centrale de Lyon	Directeur de thèse
Johnsen, Eric	Associate professor	Univ. of Michigan	Rapporteur
Pelanti, Marica	Maître de Conférences	ENSTA ParisTech	Examinatrice
Spelt, Peter D.M.	Professeur	Univ. de Lyon	Co-directeur de thèse
Zaleski, Stéphane	Professeur	Univ. Pierre et Marie Curie	Président

Remerciements

Je souhaite tout d'abord remercier mes directeurs de thèse Christophe Bogey et Peter Spelt pour la confiance qu'ils m'ont accordée, leurs conseils avisés, leur pédagogie et pour le temps consacré à la relecture des articles et de la thèse.

Mes remerciements sont ensuite adressés à Marie-Gabrielle pour son efficacité et sa disponibilité. Merci aussi à Gilles Robert, Alexis Giauque et Christophe Corre pour leur aide et conseils face aux difficultés que j'ai pu rencontrer au cours des enseignements donnés aux élèves ingénieurs.

Durant ces quatre années de thèse j'ai eu le plaisir de côtoyer Dominique notre fée du J12 et Michel passionné de Peugeot et de fenêtres fermées. J'ai également eu la chance de partager des moments bienveillants et amicaux avec Édouard et Manu.

Je souhaite aussi remercier les doctorants et post-doctorants. Je pense notamment à Romain et Roberto qui m'ont épaulée au cours des premiers mois de la thèse. Merci à Han, Yuanyuan, Sarah, Simon, Mathieu, Étienne, Thomas, Justine, Gyuzel, Maria, Giorgios, Rafael, Léo, Gabriele et Damien. Merci à Yann qui sera content que j'ai enfin pris mes valises, Bertrand et sa vision du monde, Pierre et son esprit rêveur, Miguel et ses chicas, Danny et sa culture musicale, Paul et son autre culture musicale ("On ne change pas") et Vianney, son jeu au baby et ses grains de folie (ils sont plusieurs j'en suis certaine).

Je ne peux pas écrire ces remerciements sans parler de Fred qui est un chercheur hors pair et un enseignant passionné et pédagogue comme j'aurais aimé en avoir des dizaines. Malgré qu'il ait toujours du travail, ses conseils, son écoute attentive et son humour m'ont été d'une aide précieuse.

Un grand merci à Tiphaine, Cammie, Bernard et Alda qui ont suivi toutes les étapes de la thèse, supporté et écouté parler de bulles, d'articles et de programmation pendant des heures avec patience et attention.

I sincerely want to thank Michael who tormented his mind to read and correct my English writings following the rules of the scientific Franglais language. He has been a huge support and has helped me to gain self-confidence, his force was and still is a platform that I can climb on. Merci aussi à son équipe de musiciens et techniciens professionnels Tof,

Pierrot, Jacky, Damien et Yann qui m'ont accueillie parmi eux. J'ai énormément appris à leur côté et espère que ce n'est pas près de s'arrêter !

En l'espace d'une thèse j'ai aussi observé l'apparition de deux phénomènes Charlèno-François : 30 centimètres de vie, 3 kilos de chaleur, 2 vraies sources de bonheur. Enfin, parmi ces travaux, je ne pourrais estimer la part de l'inné et de l'acquis mais ce dont je suis certaine est que quoiqu'il en soit mes parents sont toujours là. J'ai souvent entendu dire qu'on ne choisit pas sa famille. Et bien c'est tant mieux car je n'aurais jamais pu faire un si bon choix !

Résumé

Ce travail de thèse porte sur la simulation d'écoulements diphasiques compressibles, visqueux et conductifs, à l'aide de schémas numériques aux différences finies centrées d'ordre élevé. Pour cela, les équations utilisées sont les équations de Navier-Stokes complétées de deux équations d'advection décrivant l'interface et d'une équation permettant d'estimer la température au sein d'un liquide et d'un gaz. Elles sont résolues à l'aide de méthodes numériques conservatives précédemment développées pour l'aéroacoustique, adaptées dans la présente étude à la simulation d'écoulements diphasiques. Les choix des équations et des méthodes numériques sont validés à l'aide de divers cas test monodimensionnels proposés dans la littérature. Les résultats obtenus sont en accord avec les solutions analytiques ou de référence. Deux écoulements 2D composés de deux gaz sont ensuite considérés. Le premier cas concerne l'instabilité de Richtmyer-Meshkov qui se développe à l'interface entre de l'air et du SF6. Le second cas porte sur une bulle cylindrique remplie d'hélium ou de R22 impactée par une onde de choc plane se propageant dans l'air. Pour ces deux écoulements, une étude de convergence de maillage est effectuée et les solutions numériques sont comparables aux données expérimentales de la littérature. L'influence du nombre de Reynolds sur la déformation de l'interface de la bulle d'hélium est également montrée. Enfin, l'implosion d'une bulle d'air dans l'eau est étudiée. Dans un premier temps, l'implosion sphérique de la bulle suite à son interaction avec une onde de pression convergente est simulée. Les résultats sont en bon accord avec les solutions prédites par le modèle de Rayleigh-Plesset. L'influence de l'épaisseur initiale de l'interface et de la conductivité thermique est montrée. Dans un second temps, l'implosion non sphérique d'une bulle proche d'un mur et impactée par une onde de choc plane est considérée. La pression imposée sur le mur et la température au sein de l'écoulement sont quantifiées. Enfin, une étude de l'effet de la distance initiale entre le mur et la bulle sur l'implosion est menée.

Mots clés : Écoulements diphasiques, interface, compressible, visqueux, conducteur, différences finies, ordre élevé, implosion, bulle.

Abstract

This PhD work concerns the simulation of compressible, viscous and conductive two-phase flows, using high-order centered finite-difference schemes. The equations governing two-phase flows are the Navier-Stokes equations in conjunction with two advection equations governing the interface and one equation allowing to estimate the temperature within a liquid and a gas. These are solved using conservative numerical methods which are validated from the resolution of various 1D test cases taken from the literature. The results obtained are in good agreement with the analytical or reference solutions. Then, two 2-D flows composed of two gases are considered. The first case concerns the Richtmyer-Meshkov instability developing at the interface between air and SF₆. The second case deals with a cylindrical bubble filled with helium or R22 which is hit by a plane shock wave travelling through air. For these two flows, a grid convergence study is conducted and the numerical solutions compare well with the experimental data of the literature. The effect of the Reynolds number on the deformation of the bubble interface is also shown. Finally, the collapse of an air bubble in water is studied. Firstly, the spherical collapse of the bubble due to its interaction with a spherical converging shock wave is simulated. The results are in good agreement with the solutions predicted by the Rayleigh-Plesset model. The effect of the initial interface thickness and the thermal conductivity on the collapse is investigated. Secondly, the non-spherical collapse of a bubble near a wall impacted by a plane shock wave is considered. The pressure imposed on the wall and the temperature within the flow are quantified. Finally, the influence of the initial stand-off distance between the wall and the bubble is examined.

Keywords : Two-phase flows, interface, compressible, viscous, conductive, finite-differences, high-order, collapse, bubble.

Table des matières

Remerciements	1
Résumé	3
Abstract	5
Introduction	11
1 Différentes approches pour la modélisation d'écoulements diphasiques	17
1.1 Formulations des équations décrivant un écoulement diphasique	17
1.1.1 Modèle à deux fluides	17
1.1.2 Modèle à un fluide	18
1.2 Traitement numérique de l'interface	19
1.2.1 Méthodes de suivi	20
1.2.2 Méthodes de capture	22
2 Équations et relations à l'interface	27
2.1 Équations de Navier-Stokes	27
2.2 Écoulements gaz-gaz	29
2.2.1 Équation d'état pour un écoulement gaz-gaz	29
2.2.2 Équations permettant de décrire une interface gaz-gaz	31
2.3 Écoulements liquide-gaz	33
2.3.1 Équation d'état pour un écoulement liquide-gaz	33
2.3.2 Équations permettant de décrire une interface liquide-gaz	34
3 Méthodes numériques	39
3.1 Différenciation spatiale	39
3.2 Intégration temporelle	40
3.3 Filtrage sélectif	41

3.4	Méthode de capture des discontinuités	43
3.4.1	Filtrage des discontinuités	43
3.4.2	Indicateurs de monotonie	47
4	Validations des méthodes à l'aide de cas test monodimensionnels	51
4.1	Advection d'une interface gaz-gaz	51
4.1.1	Interface à faible gradient de masse volumique	51
4.1.2	Interface présentant un fort gradient de masse volumique	58
4.2	Tube à choc monophasique	59
4.3	Tube à choc gaz-gaz non-visqueux	61
4.4	Tube à choc hélium-air	64
4.5	Tubes à choc gaz-liquide	65
4.5.1	Tube à choc gaz-liquide présentant un fort gradient de pression . . .	65
4.5.2	Tube à choc gaz-liquide présentant une forte variation du paramètre γ	66
4.6	Onde de choc impactant une bulle d'hélium	69
4.7	Validation du calcul de la température	71
4.7.1	Tube à choc monophasique	71
4.7.2	Advection interface air-eau	74
5	Simulations 2-D d'écoulements gaz-gaz visqueux et conductifs	77
5.1	Instabilité de Richtmyer-Meshkov	77
5.1.1	Conditions initiales	78
5.1.2	Paramètres numériques	80
5.1.3	Comparaison avec l'expérience	81
5.1.4	Influence de la procédure de capture des discontinuités	90
5.2	Onde de choc impactant une bulle cylindrique	92
5.2.1	Conditions initiales	92
5.2.2	Paramètres numériques	94
5.2.3	Bulle d'hélium	95
5.2.4	Bulle de R22	103
6	Simulations d'implosions d'une bulle d'air dans l'eau	109
	Conclusion	143
A	Annexes	147
A.1	Coefficients des schémas numériques	147

A.2	Estimation des coefficients λ , μ , μ_v et β de l'air, de l'hélium, du SF6, du R22 et de l'eau	148
A.2.1	Viscosités dynamiques μ et viscosités de volume μ_v	148
A.2.2	Conductivités thermiques λ	151
A.2.3	Dilatations thermiques β	153
Références		155
Liste des publications		164

Introduction

Contexte

Un écoulement est appelé diphasique lorsque deux fluides le constituent ou lorsqu'une phase liquide et une phase gazeuse coexistent, comme par exemple, un milieu constitué de deux gaz ou un liquide contenant des bulles gazeuses. Les écoulements liquides contenant des bulles de gaz font l'objet de nombreux travaux portant notamment sur les phénomènes de cavitation et d'implosion de bulles. En effet, lorsqu'un milieu liquide est soumis localement à une force de traction (ou dépression) plus importante que la force de cohésion moléculaire du liquide, il s'évapore. Une cavité (ou bulle) est alors créée au sein du liquide, c'est le phénomène de cavitation. Les cavités apparaissent aux endroits où la force de cohésion moléculaire du liquide est faible. Ces endroits correspondent à des imperfections présentes au sein du liquide appelées *nuclei*.

Une bulle ainsi formée peut ensuite imploser lorsque le milieu liquide impose une pression supérieure à la pression du gaz contenu dans la bulle. Lors de l'implosion, il est possible que des pressions, vitesses et températures très élevées soient atteintes. Ce phénomène peut alors avoir des conséquences néfastes en ingénierie. En effet, des parties mécaniques telles qu'une hélice de bateau ou le compresseur d'une pompe, peuvent être endommagées suite à l'implosion de nombreuses bulles. Deux illustrations montrant des bulles formées autour d'une hélice en rotation dans l'eau ainsi que les dommages causés par l'implosion des bulles sont présentées sur la figure 1.

Comprendre et maîtriser l'implosion des bulles peut aussi être utile en médecine. En effet, l'implosion de bulles dans le sang créées à l'aide d'un champ d'ultrasons, permet de briser des calculs rénaux, vésicaux ou biliaires. Cette technique appelée *lithotripsie* permettrait aussi de détruire des cellules cancéreuses de façon non-invasive. Il peut également être envisageable d'administrer des médicaments directement au sein de cellules de l'organisme à l'aide de l'implosion de bulles très petites [15]. Enfin, l'implosion de bulles présente aussi un intérêt énergétique puisqu'elle permet, dans certaines conditions, de produire assez d'énergie pour émettre de la lumière (sonoluminescence) ou pour initier ou accélérer des réactions

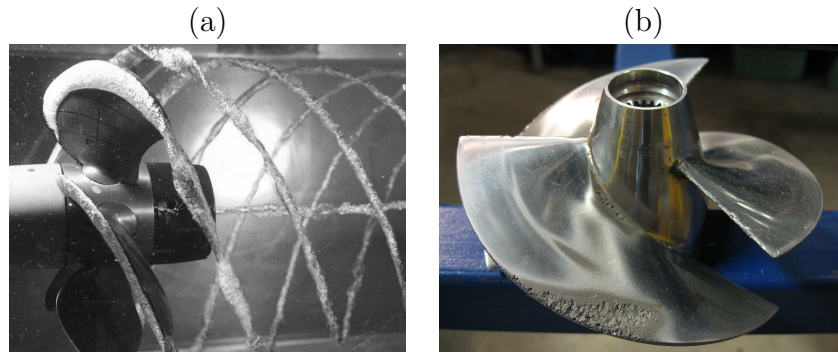


FIGURE 1 – Photographies montrant (a) la formation de bulles sur les aubes et dans le sillage d’une hélice en rotation dans l’eau (source : Wikipedia, <https://fr.m.wikipedia.org/wiki/Fichier:Cavitation.jpg>) , (b) une hélice endommagée par l’implosion de bulles (source : Wikimedia Commons, <https://en.wikipedia.org/wiki/User:Axda0002>).

chimiques (sonochimie) [97].

Généralement, une bulle ne conserve pas sa sphéricité au cours de l’implosion à cause des caractéristiques non sphériques de l’environnement dans lequel elle est contenue. Ceci est le cas, par exemple, lorsque la bulle implose à proximité d’une paroi (une autre bulle, une hélice, un calcul, ...) ou suite au passage d’une onde de choc plane. L’implosion non-sphérique d’une bulle est principalement caractérisée par la formation d’un jet de liquide traversant la bulle de part en part en direction de la paroi, dans le premier cas mentionné précédemment, ou dans la direction de propagation de l’onde de choc plane impactant la bulle, dans le second cas. Un tel jet a été observé expérimentalement par Lauterborn et Bolle [61] et par Ohl *et al.* [72, 73] lors de l’implosion d’une bulle en champ libre. L’influence de la distance initiale entre une paroi et la bulle a aussi pu être étudiée à l’aide des expériences de Lindau et Lauterborn [65] et de Shaw *et al.* [90]. Cependant, il est très difficile d’effectuer des mesures précises autour et à l’intérieur d’une bulle dont la dimension est de l’ordre du millimètre ou du micromètre et pouvant être cent fois plus petite lors de l’implosion. De plus, l’implosion d’une bulle se produit durant un instant très court, de l’ordre de quelques microsecondes ou nanosecondes. Il est donc intéressant de pouvoir simuler numériquement ces écoulements et d’avoir ainsi accès à toutes les grandeurs souhaitées.

Malheureusement, il n’est pas trivial de développer des méthodes numériques robustes et précises permettant de simuler des écoulements comprenant une interface déformable entre deux fluides différents atteignant des vitesses, pressions et températures très élevées. Notamment, afin de simuler correctement la propagation de toutes les discontinuités rencontrées au sein d’un tel écoulement, il est nécessaire d’utiliser des méthodes numériques conservatives. Il faut également que ces méthodes soient capables de traiter de fortes discontinuités sans créer d’oscillations numériques [1, 10, 53, 94]. Enfin, les simulations doivent

aussi résoudre avec précision l'écoulement loin de ces singularités.

Par exemple, Nagrath *et al.* [69] ont utilisé une méthode *ghost-fluid* associée à une méthode *level-set* afin de simuler en trois dimensions l'implosion sphérique d'une bulle en tenant compte des effets de compressibilité, de viscosité et de conductivité thermique. Shaw et Spelt [91] ont également calculé l'implosion sphérique d'une bulle d'air dans l'eau, sans viscosité, à l'aide d'une méthode *ghost-fluid*. Ce type d'implosion est couramment considéré afin de valider les simulations en comparant les résultats numériques aux solutions obtenues à l'aide de modèles tel que le modèle de Rayleigh-Plesset [80] permettant de prédire l'évolution temporelle du rayon de la bulle au cours d'une implosion sphérique. Les simulations numériques d'implosions non-sphériques d'une bulle ont principalement été effectuées en résolvant les équations d'Euler compressibles. Ainsi, à l'aide de simulations 2D et 3D non visqueuses et non conductives, Hawker et Ventikos [35] ont pu mener une étude détaillée des différentes ondes de pression rencontrées à l'intérieur et autour d'une bulle d'air impactée par un choc plan se propageant dans l'eau. Johnsen et Colonius [48] ainsi que Turangan *et al.* [108] ont mené des simulations 2D axisymétriques d'une bulle placée à proximité d'un mur et impactée par une onde de choc plane. Cependant, il a été observé par Popinet et Zaleski [77] et par Minsier *et al.* [68], en considérant un liquide incompressible, que les effets visqueux modifient la vitesse de déplacement du jet traversant la bulle lors de son implosion. De plus, Chapman et Plesset [17] ont montré que les effets de la conductivité thermique sont significatifs au cours de l'implosion d'une bulle. Très récemment, Beig et Johnsen [8] ont alors développé une méthode numérique de type volumes finis permettant de simuler l'implosion 3D d'une bulle d'air à proximité d'un mur en incluant les effets de compressibilité, de viscosité et de conductivité.

Objectif de la thèse

L'objectif principal de la thèse est de simuler des écoulements diphasiques à l'aide de schémas numériques aux différences finies centrées d'ordre élevé en tenant compte des effets compressibles, visqueux et conductifs. Pour cela, les travaux réalisés peuvent être séparés en trois parties :

- Des méthodes numériques [9, 10] initialement développées pour l'aéroacoustique sont adaptées à la simulation d'écoulements diphasiques et sont validées par la résolution de cas test monodimensionnels issus de la littérature.
- Deux écoulements bidimensionnels composés de deux gaz parfaits sont simulés à l'aide de coordonnées cartésiennes. Le premier cas concerne le développement de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov à l'interface entre de l'air et de l'hexafluorure de

soufre (SF6). Le second écoulement est composé d'une bulle cylindrique entourée d'air et remplie d'hélium ou de chlorodifluorométhane (R22). Les solutions numériques sont comparées aux données expérimentales de la littérature.

- Le problème de l'implosion d'une bulle d'air dans l'eau est ensuite étudié en considérant deux configurations. La première configuration présente une bulle d'air impactée par une onde de choc sphérique convergente. La seconde configuration comprend une bulle d'air placée à proximité d'un mur plan et impactée par une onde de choc plane se propageant dans l'eau. La première configuration a pour but d'étudier l'implosion sphérique de la bulle. Elle est simulée en résolvant les équations 1D de Navier-Stokes à l'aide de coordonnées sphériques. Les solutions numériques sont comparées au résultats fournis par une équation de Rayleigh-Plesset modifiée. L'écoulement obtenu avec la seconde configuration est simulé en résolvant les équations de Navier-Stokes à l'aide de coordonnées cylindriques au sein d'un domaine de calcul bidimensionnel et axisymétrique.

Présentation du mémoire

Le présent manuscrit est constitué de six parties. Dans la première partie, les principaux modèles d'équations et méthodes numériques développés depuis les années 60 pour la simulation d'écoulements diphasiques sont présentés. Plus précisément, le modèle de mélange et le modèle à deux fluides sont distingués. De plus, les méthodes de suivi d'interface et de capture d'interface sont différenciées. Les avantages et limitations de chacune de ces méthodes sont détaillés.

La seconde partie introduit les équations utilisées dans la présente étude afin de décrire un écoulement compressible, visqueux et conducteur constitué de deux gaz ou bien d'un gaz et d'un liquide. Les hypothèses associées à ces équations sont aussi précisées.

La troisième partie est consacrée aux méthodes numériques utilisées au cours de la thèse pour la résolution des équations. Les méthodes précédemment développées pour l'aéroacoustique sont présentées. Les modifications apportées à ces méthodes afin de les adapter à la simulation d'écoulements diphasiques sont aussi documentées.

La quatrième partie porte sur la validation des équations et des méthodes numériques employées dans la présente étude. Dix cas test monodimensionnels proposés dans la littérature sont résolus. Parmi ces cas test, plusieurs tubes à choc comprenant deux fluides permettent d'étudier l'interaction entre une onde de choc et une interface. De plus, un cas simple portant sur l'advection d'une interface entre deux fluides à pression et vitesse constantes est utilisée afin de justifier certains choix numériques. Pour chacun des cas tests,

les résultats numériques sont comparés à des solutions analytiques ou de référence.

Dans la cinquième partie, deux écoulements bidimensionnels comprenant deux gaz parfaits sont considérés. Le premier cas concerne le développement de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov à l'interface entre de l'air et de l'hexafluorure de soufre (SF₆). Le second cas porte sur l'interaction entre une onde de choc plane se propageant dans l'air et impactant une bulle cylindrique remplie d'hélium ou de chlorodifluorométhane (R22). L'influence du nombre de Reynolds et de la concentration d'air initialement contenue dans la bulle est montrée. Pour les deux écoulements, une étude de convergence de maillage est effectuée, et les résultats numériques sont comparés aux données expérimentales de Jacobs et Krivets [42] et de Haas et Sturtevant [33].

Enfin, des simulations d'implosions sphériques et non sphériques d'une bulle d'air dans l'eau sont montrées dans la sixième partie. L'implosion sphérique de la bulle est initiée à l'aide d'une onde de choc sphérique convergente. Les solutions numériques sont comparées aux prédictions fournies par une équation de Rayleigh-Plesset incluant les effets visqueux et compressibles de l'eau. L'influence de l'épaisseur initiale de l'interface et de la conductivité thermique sur les solutions est mise en évidence. L'implosion non sphérique d'une bulle est provoquée suite à l'interaction d'une onde de choc plane avec la bulle qui est placée à proximité d'un mur. Les résultats sont comparés aux solutions numériques obtenues par Johnsen et Colonius [48]. Les diverses ondes de pressions présentes dans l'eau et dans la bulle au cours de l'implosion sont identifiées. L'influence de la distance initiale entre le mur et la bulle sur l'implosion est étudiée et l'impact de l'implosion de la bulle sur le mur est quantifié. De plus, pour chaque cas présenté dans cette section, une étude de convergence de maillage est menée.

1 Différentes approches pour la modélisation d'écoulements diphasiques

1.1 Formulations des équations décrivant un écoulement diphasique

Il existe différentes équations permettant de décrire les écoulements composés de deux fluides compressibles et visqueux. Celles présentées dans ce chapitre sont valables pour un milieu continu, contenant une interface fine entre deux fluides et dont les forces intermoléculaires telles que les forces électromagnétiques sont négligeables. Deux types de modèles sont alors distingués [44, 107]. Ils sont communément appelés modèle à deux fluides et modèle à un fluide ou *single-fluid formulation*.

1.1.1 Modèle à deux fluides

Pour un écoulement compressible constitué de deux fluides non miscibles contenus dans un domaine donné, ce dernier peut alors être décomposé en deux sous-domaines contenant chacun un des deux fluides. Le modèle à deux fluides consiste alors à résoudre un système d'équations pour chaque fluide. Ainsi, les équations de Navier-Stokes peuvent être utilisées séparément au sein de chaque sous-domaine, soit un minimum de six équations d'évolutions : une équation de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale

pour chacun des deux fluides [41] :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi_\alpha \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = 0, \\ \frac{\partial \phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = \nabla \cdot (\phi_\alpha \boldsymbol{\sigma}_\alpha), \\ \frac{\partial \phi_\alpha \rho_\alpha E_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_\alpha \rho_\alpha E_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = \nabla \cdot (\phi_\alpha \boldsymbol{\sigma}_\alpha \cdot \mathbf{u}_\alpha) - \nabla \cdot (\phi_\alpha \mathbf{q}_\alpha), \end{cases} \quad (1.1)$$

où ϕ_α , ρ_α , $\mathbf{u}_\alpha$, E_α , $\boldsymbol{\sigma}_\alpha$ et $\mathbf{q}_\alpha$ sont la fraction volumique, la masse volumique, le vecteur vitesse, l'énergie totale, le tenseur des contraintes et le flux thermique du fluide α , respectivement. Les deux fluides de l'écoulement peuvent être notés fluide 1 et fluide 2, ainsi le système d'équations (1.1) est résolu pour $\alpha = \{1, 2\}$. L'avantage de ce modèle est qu'il permet de décrire chacun des deux fluides avec leurs propres températures, vitesses, pressions et équations d'état. En revanche, la résolution de deux systèmes d'équations peut conduire à un temps de calcul conséquent. De plus, les solutions obtenues pour chacun des systèmes doivent être couplées à l'aide de termes de transfert afin de respecter les conditions à l'interface. Ils apparaissent alors dans les équations (1.1) sous forme de termes source [41].

1.1.2 Modèle à un fluide

Le modèle à un fluide permet de considérer un écoulement diphasique comme un milieu à un seul fluide dont certaines propriétés changent au passage de l'interface. Ce modèle nécessite que la vitesse et la température soient continues à l'interface [18, 111]. Le modèle à un fluide peut être obtenu à partir du modèle à deux fluides par sommation du système d'équations (1.1) sur $\alpha = \{1, 2\}$, et à l'aide de moyennes pondérées par la fraction volumique, comme par exemple pour la masse volumique du milieu $\rho_m = \sum_\alpha \phi_\alpha \rho_\alpha$. Un seul système d'équations permet alors de décrire l'écoulement. Il est constitué d'équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale. Il peut s'écrire de la façon suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}_m) = 0, \\ \frac{\partial \rho_m \mathbf{u}_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}_m \mathbf{u}_m) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m, \\ \frac{\partial E_m}{\partial t} + \nabla \cdot (E_m \mathbf{u}_m) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}_m \cdot \mathbf{u}_m) - \nabla \cdot \mathbf{q}_m, \end{cases} \quad (1.2)$$

où ρ_m , $\mathbf{u}_m$, E_m , $\boldsymbol{\sigma}_m$ et $\mathbf{q}_m$ sont la masse volumique, le vecteur vitesse, l'énergie totale, le tenseur des contraintes et le flux thermique du milieu, respectivement. Quatre relations de fermeture sont alors nécessaires. Trois d'entre elles indiquent que la température, la

pression et la vitesse sont communes entre les fluides. La dernière relation de fermeture est une équation d'état permettant de relier la pression à l'énergie totale du milieu. Une seule équation d'état valable pour les deux fluides peut alors être utilisée. L'utilisation de ce modèle présente une contrainte. En effet, certains champs tels que la masse volumique, l'énergie totale ou les propriétés des fluides possèdent une discontinuité à la frontière entre les deux fluides. Par conséquent, en cas de nettes discontinuités des instabilités numériques peuvent être produites, comme les oscillations de Gibbs, par exemple. En revanche, la résolution d'un seul système d'équations permet de respecter directement les conditions de continuité et de saut à l'interface. De plus, les fusions et ruptures d'interfaces sont automatiquement simulées grâce à ce modèle. L'ensemble des travaux de cette thèse a été réalisé à l'aide de ce modèle. Toutes les équations, les hypothèses et les variables utilisées seront détaillées dans le chapitre 2.

1.2 Traitement numérique de l'interface

Les méthodes numériques telles que les volumes finis, les éléments finis ou les différences finies permettent toutes de résoudre les équations de Navier-Stokes. Cependant, dans le cas d'écoulements diphasiques, ces méthodes doivent être associées à d'autres techniques permettant de connaître et d'actualiser la position de l'interface. Plusieurs techniques développées depuis les années 60 peuvent être classées en deux grandes catégories : les méthodes nécessitant un maillage mobile et celles utilisant un maillage fixe [44, 107, 111]. La principale différence entre ces deux catégories est que lorsqu'un maillage mobile est utilisé pour calculer les solutions, celui-ci se déplace avec l'écoulement. Ainsi la position de l'interface est connue grâce au maillage. En revanche, dans le cas d'un maillage fixe, il est nécessaire d'employer des marqueurs ou une fonction de marquage permettant de suivre les déplacements de l'interface.

Parmi les méthodes basées sur des maillages mobiles, il y a les méthodes appelées *interface-fitting* [81], *boundary integral* [115] et *Finite Element-based Lagrangian* [27]. Elles sont efficaces et précises pour la simulation d'écoulements aux géométries simples, pour lesquels la déformation de l'interface est relativement faible. En revanche, elles présentent des difficultés lorsqu'il s'agit de simuler d'importantes déformations, des ruptures ou des fusions d'interfaces. Ces méthodes sont donc peu adaptées à la présente étude dont l'objectif final est de simuler l'implosion d'une bulle d'air dans l'eau.

En revanche, les méthodes aux maillages fixes sont largement utilisées pour la simulation d'écoulements diphasiques. Elles sont plus faciles à implémenter et moins coûteuses en temps de calcul. Elles peuvent être classées en deux catégories : les méthodes de suivi et les

méthodes de capture.

Dans la suite du présent chapitre, un aperçu des principales méthodes utilisées pour la simulation numérique d'écoulements diphasique est proposé. Une liste plus exhaustive de ces méthodes peut être trouvée dans les travaux de Tryggvason *et al.* [107].

1.2.1 Méthodes de suivi

Les méthodes de suivi sont aussi appelées méthodes semi eulérienne-lagrangienne. Ceci signifie que l'écoulement est calculé à l'aide d'une approche eulérienne sur un maillage fixe tandis que l'interface est représentée à l'aide de marqueurs advectés de manière lagrangienne. Les marqueurs permettent de suivre les déplacements d'un des deux fluides (*volume-tracking method*) ou de l'interface (*front-tracking method*).

Méthode *Marker And Cell*

La méthode appelée *Marker And Cell* (MAC), développée par Harlow et Welch en 1965 [34], est l'une des premières méthodes à avoir été utilisée pour la simulation d'écoulements incompressibles constitués d'un liquide à surface libre. Elle a ensuite été adaptée à la simulation d'écoulements diphasiques et notamment des instabilités de Rayleigh-Taylor par Daly [22, 23]. Comme représenté sur la figure 1.1, la méthode MAC consiste à ensemen- cer l'un des deux fluides à l'aide de particules de masse nulle appelées marqueurs, afin de suivre les mouvements de ce fluide. L'objectif étant de suivre le volume d'un des deux fluides, il s'agit donc d'une méthode de type *volume-tracking*. La première méthode MAC proposée par Harlow et Welch [34] est implémentée sur un maillage fixe uniforme à l'aide de schémas aux différences finies. Dans ce cas, l'écoulement est décrit à l'aide de solutions eulériennes combinées au suivi lagrangien du volume d'un fluide. Cette méthode présente plusieurs difficultés. Notamment, il est possible que certaines zones du domaine de calcul ne contiennent aucun marqueur. De plus, l'interface est dissipée numériquement et un grand nombre de marqueurs est nécessaire afin de connaître la position précise de l'interface, ce qui est très coûteux en temps de calcul.

Méthodes *front-tracking*

Les méthodes de suivi d'interface aussi appelées *front-tracking methods* ont principale- ment été développées par Glimm *et al.* [29]. Le plus souvent, deux maillages sont employés. Un premier maillage, fixe, est utilisé dans tout le domaine de calcul afin de résoudre le système d'équations décrivant l'écoulement, et un second maillage, mobile, présent uni- quement à proximité de l'interface permet de suivre la frontière entre les deux fluides sur

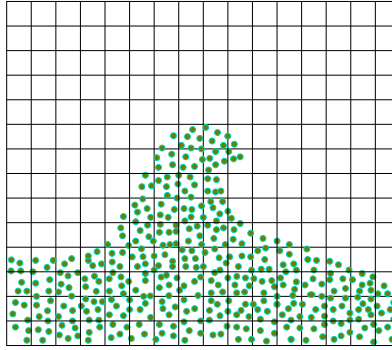


FIGURE 1.1 – Représentation d'un maillage uniforme en noir, et de marqueurs en vert, utiles à la méthode *Marker And Cell* afin d'identifier la position d'un fluide au sein d'un écoulement diphasique.

laquelle sont placés des marqueurs. Une illustration simple de maillages utilisés pour le suivi d'interface est représentée sur la figure 1.2. Pour des problèmes multi-dimensionnels, un grand nombre de marqueurs connectés entre eux est nécessaire afin de représenter des courbes (en 2 dimensions), ou des surfaces (en 3 dimensions). Les différentes méthodes de suivi d'interface se distinguent par la façon dont sont disposés les marqueurs et comment ils sont déplacés lorsque l'interface est étirée et déformée. Elles se différencient aussi par la façon dont les marqueurs et le maillage fixe interagissent. Enfin, il existe aussi différentes manières de simuler une rupture ou une coalescence de l'interface. La plupart des méthodes de suivi d'interface utilisent des maillages triangulaires non structurés afin de représenter l'interface. Ceci permet d'ajouter ou de supprimer des marqueurs lorsque la frontière entre les fluides est étirée ou comprimée. Le principal avantage de ces méthodes est qu'elles permettent de connaître très précisément la position d'une interface dont l'épaisseur est nulle. En contrepartie, les ajouts et suppressions de marqueurs sont complexes à traiter numériquement surtout en cas de rupture ou de fusion d'interfaces. Nguyen *et al.* [70] ont récemment employé cette méthode afin de calculer la déformation d'une goutte d'eau compressible et non visqueuse excitée par impulsions acoustiques. Divers écoulements visqueux et incompressibles ont également été simulés par Tryggvason *et al.* [106] à l'aide de cette méthode.

Les méthodes de frontières immergées (*immersed boundary methods*) [75, 109] sont aussi des méthodes de suivi d'interface où l'écoulement est calculé à l'aide d'un maillage cartésien fixe et où l'interface est représentée par des marqueurs qui sont advectés de façon lagrangienne. En général, ces marqueurs ne coïncident pas avec les nœuds du maillage fixe utilisé pour résoudre les équations. Par conséquent, le champ de vitesse de l'écoulement défini sur le maillage fixe est interpolé afin d'obtenir la vitesse des marqueurs. L'écoulement est décrit à l'aide d'un seul système d'équations valable pour les deux fluides. Les conditions à l'in-

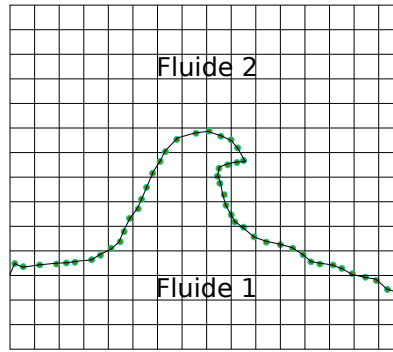


FIGURE 1.2 – Représentation d'un maillage fixe en noir et d'un maillage mobile composé de marqueurs en vert utiles aux méthodes de suivi d'interface (*front-tracking methods*).

terface sont alors prises en compte par l'intermédiaire de termes sources. Ainsi, l'interface possède une épaisseur non-nulle au sein de laquelle les propriétés des fluides changent de façon continue. De plus, les propriétés des fluides ne sont pas advectées. Elles sont actualisées en fonction de la position de l'interface. Ainsi, l'interface possède une épaisseur constante qui n'est pas dissipée numériquement.

1.2.2 Méthodes de capture

Les méthodes de capture ou méthodes eulériennes sont implémentées sur un maillage fixe. Un seul système d'équations valable pour les deux fluides est résolu dans tout le domaine de calcul et la position de l'interface est connue grâce à l'advection d'une fonction de marquage f . Cette fonction est définie de façon à valoir 1 dans un fluide et 0 dans l'autre. Elle est advectée par l'écoulement et connaissant le vecteur vitesse $\mathbf{u}$ de l'écoulement, la fonction f est obtenue en intégrant temporellement l'équation

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f = 0. \quad (1.3)$$

Les différentes méthodes de capture d'interface se distinguent notamment par le choix de la fonction de marquage. Les deux principales méthodes utilisées pour la simulation d'écoulements diphasiques compressibles sont les méthodes *level-set* et *Volume Of Fluid* (VOF). L'un des principaux avantages des méthodes de capture est qu'elles permettent de simuler automatiquement la rupture ou la fusion de l'interface, dans le cas par exemple d'une division ou d'une coalescence de bulles.

Méthode *level-set*

La méthode *level-set* a été introduite par Osher et Sethian en 1988 [74] et développée ensuite par Sussman *et al.* [99] pour la simulation d'écoulements diphasiques. Dans cette méthode la fonction de marquage $f = F(\mathbf{x}, t)$ est positive dans un fluide et négative dans l'autre, et la valeur de la fonction est égale à la distance à l'interface le long de la direction normale à l'interface. Par conséquent, la frontière entre les deux fluides est identifiée par la courbe $F(\mathbf{x}, t) = 0$.

La méthode *level-set* permet d'estimer avec précision la position ainsi que la courbure de l'interface utiles au calcul des forces de tensions surfaciques. De plus, la fonction F ne présente pas de discontinuité nette. La zone de transition d'une valeur positive à une valeur négative s'étend sur plusieurs mailles. Ceci permet de résoudre numériquement l'équation (1.3) sans générer d'oscillation numérique. Cependant, lorsque la fonction *level-set* est advectée il apparaît généralement que l'épaisseur de la zone de transition d'un fluide à l'autre varie. La fonction ne correspond donc plus à la distance exacte entre un point de l'écoulement et l'interface. Il est alors nécessaire de réinitialiser la fonction. Pour cela une équation non-linéaire aux dérivées partielles est résolu périodiquement au cours du calcul. L'équation proposée par Sussman *et al.* [99] est exprimée par

$$\frac{\partial F(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \text{sign}(F_0(\mathbf{x}))(1 - |\nabla F(\mathbf{x}, t)|),$$

où $F_0(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}, t = 0)$ est une fonction dont la courbe $F_0(\mathbf{x}) = 0$ décrit l'interface entre les deux fluides. Ainsi, la solution à cette équation est une fonction $F(\mathbf{x}, t)$ correspondant à la distance normale, positive ou négative, à la courbe $F_0(\mathbf{x}) = 0$. Lors de lentes déformations de l'interface, la période de réinitialisation peut être longue, de l'ordre de plusieurs pas de temps. En revanche, lorsque l'interface se déforme rapidement il est nécessaire de réinitialiser la fonction *level-set* à chaque itération. Cette fréquente procédure de réinitialisation peut modifier la position de l'interface. Celle-ci ne correspond alors plus exactement à la courbe $F(\mathbf{x}, t) = 0$. La masse des fluides n'est donc plus conservée. Pour corriger cela il existe plusieurs techniques qui ont été recensées par Solomenko *et al.* [96]. La méthode *level-set* a permis de calculer la coalescence de deux bulles gazeuses par Tornberg et Engquist [104] et par Sussman *et al.* [98]. Plus récemment, Nagrath *et al.* [69] ont pu simuler l'implosion d'une bulle d'air dans l'eau en tenant compte des effets visqueux.

Méthodes *Volume Of Fluid*

Les méthodes *Volume Of Fluid* (VOF) utilisent un champ scalaire noté C comme fonction de marquage. Elle est appelée fonction couleur ou volume de phase, et représente le volume occupé par un fluide dans une maille. Ainsi, elle vaut 1 lorsque la maille contient uniquement un fluide, et elle vaut 0 lorsque la maille comprend l'autre fluide uniquement. De cette façon, une maille prenant une valeur comprise entre 0 et 1 indique que cette maille se situe dans une interface. Les méthodes VOF peuvent être classées en deux catégories : les méthodes VOF avec et sans reconstruction de l'interface.

Avec reconstruction de l'interface La première méthode permettant de reconstruire l'interface au sein d'écoulements diphasiques est la méthode VOF SLIC (Simple Line Interface Calculation) introduite par Noh et Woodward en 1976 [71]. Elle permet de représenter l'interface au sein d'une maille uniquement à l'aide de segments parallèles aux directions du maillage. Cette méthode est limitée puisque l'interface est soit horizontale soit verticale et n'est pas obligatoirement continue à la frontière entre deux mailles voisines. Une autre méthode similaire à la méthode VOF SLIC a été proposée par Hirt et Nichols en 1981 [40]. Elle consiste à déterminer la normale à l'interface en utilisant les cellules voisines. Ainsi, l'interface est soit verticale soit horizontale selon si l'orientation de la normale à l'interface est proche de la direction verticale ou horizontale. Enfin, la méthode VOF PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation) développée par Youngs en 1982 [114] permet de représenter l'interface au sein d'une maille par un segment dont l'orientation est choisie selon l'orientation de la normale à l'interface. L'orientation est alors arbitraire, et n'est pas uniquement horizontale ou verticale. La méthode VOF PLIC a ensuite été optimisée notamment par Kothe *et al.* à l'aide de différences finies [58]. Enfin, Rudman [85] a proposé une optimisation des méthodes de reconstruction de l'interface en utilisant des volumes finis, et il a comparé les résultats calculés à l'aide de la méthode optimisée avec ceux obtenus en utilisant les méthodes SLIC de Noh et Woodward [71], de Hirt et Nichols [40] et de Youngs [114].

Sans reconstruction de l'interface Il existe une alternative à la reconstruction de l'interface lorsqu'une méthode VOF est employée. L'interface peut en effet simplement être décrite par l'advection d'un champ scalaire correspondant à une quantité physique telle que la fraction volumique, la fraction massique ou une constante caractéristique du fluide. De cette manière, la position de l'interface est identifiée grâce à la présence d'une discontinuité dans le champ scalaire au passage d'un fluide à l'autre. Cependant, lors de la résolution de l'équation d'advection (1.3) à l'aide de schémas d'ordres élevés, des oscillations numériques appelées oscillations de Gibbs peuvent apparaître de part et d'autre de cette discontinuité.

Plusieurs méthodes ont alors été développées afin d'éviter l'apparition de ces oscillations.

Les méthodes TVD (Total Variation Diminishing) nécessitent l'utilisation de deux types de limiteurs [100, 113] : les limiteurs de pente et les limiteurs de flux. Le premier impose une contrainte sur les gradients des variables tandis que le second impose une contrainte sur les gradients des flux.

Les méthodes ENO (Essentially Non-Oscillatory) [92, 93] consistent à calculer une fonction test en chaque point du maillage afin de déterminer quel schéma numérique employer parmi une sélection de schémas centrés et décentrés. Cependant, l'utilisation d'une fonction test en chaque point du maillage nécessite un temps de calcul important. Afin de s'affranchir de cette contrainte, les méthodes WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) [46] n'utilisent pas de fonction test. Un poids est appliqué à chacun des schémas. Ainsi, une combinaison des schémas numériques centrés et décentrés est utilisée en chaque point du maillage. Les méthodes WENO ont été utilisées par exemple par Latini *et al.* [60] afin de simuler le développement d'une instabilité de Richtmyer-Meshkov. Ils ont notamment étudié l'effet de l'ordre de la méthode choisie sur la forme de l'interface. Johnsen et Colonius [48] ont également choisi cette méthode pour la simulation de l'implosion d'une bulle d'air dans l'eau à proximité d'un mur.

Enfin, l'apparition d'oscillations de Gibbs peut également être évitée en ajoutant un terme de dissipation aux solutions des équations de Navier-Stokes. Cette méthode a été développée par Jameson *et al.* [45] pour la simulation d'un écoulement d'air transsonique autour d'un profil d'aile. Tam et Shen [103] et Bogey *et al.* [10] ont alors adapté ce type de méthodes à l'aéroacoustique numérique. La méthode proposée par Bogey *et al.* [10] consiste à utiliser un filtrage conservatif dont l'amplitude est ajustée à chaque itération à l'aide d'un capteur. A titre d'exemple, cette méthode a été utilisée par de Cacqueray *et al.* [25] et Gojon *et al.* [30] pour le calcul du rayonnement acoustique de jets supersoniques. L'un des travaux de cette thèse a consisté à adapter cette procédure de capture de choc à la capture de chocs et d'interfaces afin de simuler des écoulements compressibles diphasiques.

A noter que, contrairement aux méthodes VOF avec reconstruction de l'interface, l'interface possède dans ce cas une épaisseur de l'ordre de quelques mailles. Il existe donc une zone de transition entre les deux fluides où la fonction de marquage f est comprise entre 0 et 1. Cette zone est plus ou moins large selon si les schémas numériques utilisés sont fortement ou faiblement dissipatifs. Il est donc important de choisir des schémas appropriés afin d'éviter l'apparition d'oscillations de Gibbs tout en conservant une interface de faible épaisseur.

Ce premier chapitre a permis d'introduire les principaux modèles et méthodes numériques utilisés pour la simulation des écoulements diphasiques. Les avantages et limites de

chacune de ces méthodes ont été détaillés. Enfin, le modèle à un fluide (*single-fluid formulation*) ainsi que les méthodes *Volume of Fluid* sans reconstruction de l'interface employés dans la présente étude, ont pu être introduits. Ainsi, les travaux effectués dans le cadre de la thèse peuvent être situés parmi les principales méthodes de la littérature.

2 Équations et relations à l'interface

Dans cette étude, le modèle à un fluide (*single-fluid formulation*) introduit dans la section 1.1.2 est utilisé. Un seul système d'équations décrivant un milieu constitué de deux fluides est considéré. Les équations constituant ce système ainsi que les relations qui lui sont associées sont introduites dans ce chapitre.

Comme précédemment expliqué dans le chapitre 1, une méthode de capture d'interface sera utilisée dans le cadre de cette thèse. Par conséquent, l'interface possède une fine épaisseur. Cette zone de transition d'un fluide à une autre ne correspond ni à une zone de mélange entre les deux fluides ni à un écoulement ensemencé d'une multitude de petites bulles ou gouttelettes. En effet, ceci nécessiterait un autre type de modèle que celui introduit dans le présent chapitre. Le modèle à un fluide est détaillé ici pour un écoulement diphasique constitué de deux fluides non miscibles séparés par une interface infiniment fine. A l'issue de ce chapitre, la justification de la présence d'une zone de transition entre les deux fluides sera donnée.

2.1 Équations de Navier-Stokes

Chaque fluide α constituant le milieu occupe une partie V_α du volume total de l'écoulement V qui est définie par la fraction volumique $\phi_\alpha = V_\alpha/V$, telle que $\sum_\alpha \phi_\alpha = 1$. Ainsi, la masse volumique et l'énergie interne du milieu ont pour définition :

$$\rho = \sum_\alpha \phi_\alpha \rho_\alpha \quad \text{et} \quad \rho e = \sum_\alpha \phi_\alpha \rho_\alpha e_\alpha, \quad (2.1)$$

où ρ_α est la masse par unité de volume de fluide α et e_α est l'énergie interne par unité de masse de fluide α . Les équations permettant de décrire l'écoulement sont alors obtenues à partir des équations de Navier-Stokes écrites pour chacun des fluides α , pondérées par la fraction volumique ϕ_α et sommées sur α . Les composantes du vecteur vitesse sont continues

pour un écoulement visqueux sans changement de phase. Ainsi, un seul champ de vitesse commun aux deux fluides est défini, soit $\mathbf{u}_\alpha = \mathbf{u}$. La température est supposée continue à l'interface entre les deux fluides donc $T_\alpha = T$. Par conséquent, les équations pré-constitutives décrivant l'écoulement d'un milieu compressible, visqueux et conducteur sont les suivantes :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 , \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} , \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial u_i E}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\sigma_{ij} u_j) - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} , \end{cases} \quad (2.2)$$

où $E = \rho |\mathbf{u}|^2 / 2 + \rho e$ est l'énergie totale volumique du milieu. Dans cette étude, l'interface est supposée très fine. Par conséquent les flux de chaleur sont continus à l'interface [6]. Cependant, une discontinuité peut être prise en compte en incluant un terme source dans l'équation d'évolution de l'énergie totale. De plus, les forces de tension surfacique ne sont pas prises en compte. Ainsi, la force de traction du fluide à l'interface est également continue [6]. Lorsque les forces de tension surfacique sont prises en compte, elles apparaissent sous la forme d'un terme source dans les équations d'évolution de la quantité de mouvement et de l'énergie totale.

Le système d'équations (2.2) est obtenu en calculant la somme des équations de Navier-Stokes décrivant l'écoulement de chaque fluide α séparément. Selon le modèle de Navier-Stokes-Fourier, la relation pour le tenseur des contraintes du milieu σ_{ij} s'écrit donc

$$\sigma_{ij} = - \left(p - \mu_v \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) , \quad (2.3)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker, μ est la viscosité dynamique du milieu, μ_v est la viscosité de volume du milieu et p est la pression thermodynamique qui est différente de la pression mécanique $p_m = p - \mu_v \nabla \cdot \mathbf{u}$. La pression thermodynamique p correspond à la somme des pressions partielles de chaque fluide p_α :

$$p = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} p_{\alpha} . \quad (2.4)$$

La composante du flux thermique selon la direction i est égale à

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} , \quad (2.5)$$

où λ est la conductivité thermique du milieu et T est la température. La viscosité dynamique,

la viscosité de volume et la conductivité thermique du milieu sont définies par les relations suivantes :

$$\mu = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \mu_{\alpha} , \quad \mu_v = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \mu_{v\alpha} \quad \text{et} \quad \lambda = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \lambda_{\alpha} . \quad (2.6)$$

Les relations empiriques utilisées pour le calcul de μ_{α} , $\mu_{v\alpha}$ et λ_{α} pour chaque fluide considéré dans cette étude sont données dans l'annexe A.2.

Le système d'équations (2.2) nécessite une équation d'état reliant la pression à l'énergie totale du milieu. De plus, la position de la frontière entre les deux fluides doit être actualisée à l'aide de l'advection d'une fonction de marquage. L'ensemble de ces équations supplémentaires est maintenant présenté en distinguant les écoulements gaz-gaz des écoulements liquide-gaz.

2.2 Écoulements gaz-gaz

2.2.1 Équation d'état pour un écoulement gaz-gaz

L'énergie interne du milieu par unité de volume peut être développée à partir de l'équation (2.1) et de la définition de l'enthalpie pour chaque fluide,

$$\rho e = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \rho_{\alpha} e_{\alpha} = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \rho_{\alpha} (h_{\alpha} - p_{\alpha} / \rho_{\alpha}) , \quad (2.7)$$

où h_{α} est l'enthalpie massique du gaz α . À l'aide de la relation (2.4), l'équation précédente devient

$$\rho e + p = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \rho_{\alpha} h_{\alpha} . \quad (2.8)$$

Les gaz utilisés dans cette étude sont supposés parfaits. Ainsi le coefficient de dilatation thermique β_{α} de chaque gaz est égal à l'inverse de la température, soit $\beta_{\alpha} = 1/T$, et $dh_{\alpha} = c_{p,\alpha} dT$, où $c_{p,\alpha}$ est la capacité calorifique à pression constante du gaz α . Comme les gaz sont parfaits, leurs capacités calorifiques sont constantes. De plus, la température étant continue à l'interface, la relation (2.8) devient

$$\rho e + p = T \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \rho_{\alpha} c_{p,\alpha} . \quad (2.9)$$

Le cas plus général considérant un gaz non parfait sera discuté à la fin de ce paragraphe. Dans le but d'obtenir une équation d'état pour un milieu composé de gaz, il est nécessaire de déterminer une expression pour c_p . Pour cela, la fraction molaire définie comme le nombre

de moles de fluide α divisé par le nombre total de moles du milieu est notée n_α , et la fraction massique du fluide α par unité de masse du milieu est notée Y_α . Ces deux quantités vérifient les relations $\sum_\alpha n_\alpha = 1$ et $\sum_\alpha Y_\alpha = 1$. Ainsi, la masse molaire du milieu $\mathcal{M}$ est égale à

$$\mathcal{M} = n_\alpha \mathcal{M}_\alpha / Y_\alpha, \quad (2.10)$$

où $\mathcal{M}_\alpha$ est la masse molaire du fluide α . En multipliant cette relation par $Y_\alpha / (\mathcal{M}_\alpha \mathcal{M})$, et en sommant sur α , elle devient [49]

$$\frac{1}{\mathcal{M}} = \sum_\alpha \frac{Y_\alpha}{\mathcal{M}_\alpha}. \quad (2.11)$$

En multipliant par la constante universelle des gaz R_u , la constante spécifique du milieu R est alors obtenue :

$$R = \frac{R_u}{\mathcal{M}} = \sum_\alpha Y_\alpha R_\alpha, \quad (2.12)$$

où $R_\alpha = R_u / \mathcal{M}_\alpha$ est la constante spécifique du gaz α . Pour chaque gaz parfait, la constante spécifique satisfait la relation de Mayer telle que, $R_\alpha = c_{p,\alpha} - c_{v,\alpha}$, où $c_{v,\alpha}$ est la capacité calorifique à volume constant du gaz α . Les capacités calorifiques du milieu sont alors égales à [49]

$$c_p = \sum_\alpha Y_\alpha c_{p,\alpha} \quad \text{et} \quad c_v = \sum_\alpha Y_\alpha c_{v,\alpha}. \quad (2.13)$$

La fraction massique du fluide α est par définition égale à

$$\rho Y_\alpha = \phi_\alpha \rho_\alpha. \quad (2.14)$$

En utilisant la loi des gaz parfaits suivante

$$p_\alpha = \rho_\alpha R_\alpha T, \quad (2.15)$$

et à l'aide de l'équation (2.14), on obtient

$$\phi_\alpha p_\alpha = \rho T Y_\alpha R_\alpha. \quad (2.16)$$

En sommant ensuite sur α et en utilisant la relation (2.12), la pression du milieu est reliée à la température par l'expression

$$p = \rho R T. \quad (2.17)$$

Par ailleurs, à l'aide des équations (2.13) et (2.14), la relation (2.9) devient

$$\rho e + p = \rho c_p T. \quad (2.18)$$

Ainsi, les deux équations précédentes permettent d'obtenir

$$\rho e = p \left(\frac{c_p}{R} - 1 \right). \quad (2.19)$$

Finalement, l'équation d'état du milieu composé de gaz parfaits s'écrit [49]

$$\rho e = \frac{p}{\gamma - 1}, \quad (2.20)$$

où $\gamma = c_p/c_v$ est le rapport des capacités calorifiques. Il est aussi possible d'obtenir des relations pour exprimer d'autres variables du milieu telles que la vitesse du son c ou l'entropie S . Cependant, les fractions volumiques et massiques nécessaires au calcul des propriétés du milieu restent indéterminées.

2.2.2 Équations permettant de décrire une interface gaz-gaz

Afin de pouvoir résoudre le système d'équations (2.2) associé aux relations (2.3) et (2.5) et complété par les équations d'état du milieu (2.17) et (2.20), il est nécessaire de connaître la composition du milieu (fraction volumique ou fraction massique). Elle peut être décrite par une équation d'advection d'une fonction scalaire $\chi(\mathbf{x}, t)$ écrite sous la forme non conservative

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \chi = 0, \quad (2.21)$$

ou sous la forme conservative, en utilisant une équation de continuité pour un milieu,

$$\frac{\partial \rho \chi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \chi) = 0. \quad (2.22)$$

Une option possible consiste à advecter la fraction massique de l'un des deux fluides, soit $\chi = Y_1$, pour laquelle ces équations de transport sont exactes. Les capacités calorifiques et leur rapport γ , ainsi que la constante spécifique des gaz R et la masse molaire du milieu $\mathcal{M}$, peuvent alors être estimés à l'aide des relations présentées dans le paragraphe précédent. Cependant, il est tout de même nécessaire de connaître la fraction volumique pour calculer les viscosités et conductivités thermiques en utilisant les équations (2.6). Elle peut être obtenue en supposant que la pression est continue à l'interface. Ainsi, en substituant les équations d'état des gaz parfaits (2.15) et (2.17) dans l'expression de la fraction massique

(2.14), la relation suivante est obtenue :

$$Y_\alpha = \phi_\alpha R / R_\alpha = \phi_\alpha \mathcal{M}_\alpha / \mathcal{M} . \quad (2.23)$$

D'autres choix pour la fonction scalaire χ sont possibles. En effet, la plupart des relations développées précédemment sont des moyennes pondérées par la fraction massique, comme par exemple, le rapport des capacités calorifiques γ . Sachant que les fractions massiques de chacun des fluides satisfont les équations d'advection (2.21) et (2.22), alors les propriétés du milieu satisfont aussi ces équations. Ainsi, la fonction scalaire $\chi = 1/(\gamma - 1)$ proposée par Abgrall [1] est utilisée dans de nombreuses études :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) = 0 . \quad (2.24)$$

Cette équation est exacte pour un milieu composé de gaz parfaits. En effet, à partir de l'égalité suivante

$$\frac{1}{(\gamma_\alpha - 1)} = \frac{c_{v,\alpha}}{(c_{p,\alpha} - c_{v,\alpha})} = \frac{c_{v,\alpha}}{R_\alpha}, \quad (2.25)$$

dont la moyenne pondérée par la fraction volumique vaut

$$\sum_\alpha \phi_\alpha \frac{1}{(\gamma_\alpha - 1)} = \sum_\alpha \phi_\alpha \frac{c_{v,\alpha}}{R_\alpha}, \quad (2.26)$$

et d'après la relation (2.23), on obtient

$$\sum_\alpha \phi_\alpha \frac{c_{v,\alpha}}{R_\alpha} = \sum_\alpha \frac{Y_\alpha c_{v,\alpha}}{R}. \quad (2.27)$$

Enfin, à l'aide de l'équation (2.13), il est possible d'écrire

$$\sum_\alpha \frac{Y_\alpha c_{v,\alpha}}{R} = \frac{c_v}{R} = \frac{1}{(\gamma - 1)}. \quad (2.28)$$

Par conséquent, l'équation d'advection de $\chi = 1/(\gamma - 1)$ est équivalente à

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) = \frac{1}{R} \sum_\alpha c_{v,\alpha} \left(\frac{\partial Y_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Y_\alpha \right) = 0. \quad (2.29)$$

Bien que la présente étude ne traite que de gaz parfaits, il est possible de généraliser cette description aux écoulements de gaz réels en prenant en compte un terme source égal à $1/R \sum_\alpha Y_\alpha Dc_{v,\alpha} / Dt \sim \frac{DT}{Dt}$.

Le choix de la fonction scalaire χ est très important. En effet, l'advection de certaines quantités, comme la fraction massique par exemple, peut générer d'importantes oscillations numériques. Ceci sera discuté dans le chapitre 4. Des oscillations numériques sont aussi observées lorsque la forme conservative de l'équation (2.39) est utilisée.

Il reste à déterminer les fractions volumiques et massiques. Les relations (2.26), (2.27) et (2.28) permettent de relier la fraction volumique à la quantité $1/(\gamma - 1)$,

$$\frac{1}{(\gamma - 1)} = \sum_{\alpha} \frac{\phi_{\alpha}}{(\gamma_{\alpha} - 1)}. \quad (2.30)$$

Par conséquent, pour un écoulement constitué de deux gaz 1 et 2, les fractions volumiques de ces gaz sont

$$\phi_1 = \frac{1/(\gamma_1 - 1) - 1/(\gamma - 1)}{1/(\gamma_2 - 1) - 1/(\gamma_1 - 1)} \quad \text{et} \quad \phi_2 = 1 - \phi_1. \quad (2.31)$$

Enfin, les fractions massiques sont déterminées à partir des fractions volumiques par combinaison des équations (2.11) et (2.23) :

$$Y_1 = \frac{\phi_1 \mathcal{M}_1}{\mathcal{M}_2 - \phi_1(\mathcal{M}_2 - \mathcal{M}_1)} \quad \text{et} \quad Y_2 = 1 - Y_1. \quad (2.32)$$

2.3 Écoulements liquide-gaz

De la même manière que pour les écoulements gazeux, les écoulements diphasiques constitués d'un gaz et d'un liquide sont décrits par les équations pré-constitutives (2.2) associées aux équations (2.3) - (2.6). En revanche, certaines relations ainsi que les équations d'état obtenues précédemment pour un milieu composé de gaz parfaits ne sont plus vérifiées.

2.3.1 Équation d'état pour un écoulement liquide-gaz

La résolution d'un seul système d'équations décrivant un écoulement diphasique nécessite d'utiliser une équation d'état valable pour chacune des phases le constituant. Elle peut être écrite sous la forme d'une équation de Mie-Grüneisen [76], telle que

$$p_{\alpha}(\rho_{\alpha} e_{\alpha}, \rho) = (\Gamma_{\alpha}(\rho_{\alpha}) - 1) \rho_{\alpha} e_{\alpha} - \Pi_{\alpha}(\rho_{\alpha}), \quad (2.33)$$

où $\Gamma_{\alpha}(\rho_{\alpha})$ et $\Pi_{\alpha}(\rho_{\alpha})$ sont des fonctions dont l'expression dépend de l'équation d'état considérée. L'équation d'état raidie est une forme simplifiée de l'équation de Mie-Grüneisen avec $\Gamma_{\alpha}(\rho_{\alpha}) = \gamma_{\alpha}$ et $\Pi_{\alpha}(\rho_{\alpha}) = \gamma_{\alpha} B_{\alpha}$ où γ et B sont des grandeurs caractéristiques du fluide

déterminées expérimentalement. L'intérêt de l'équation d'état raidie est qu'elle permet de relier l'énergie interne à la pression d'un gaz ou d'un liquide [4, 51]. Pour un fluide α , elle s'écrit

$$p_\alpha = (\gamma_\alpha - 1)\rho_\alpha e_\alpha - \gamma_\alpha B_\alpha. \quad (2.34)$$

Dans le cas d'un gaz, elle est identique à l'équation d'état des gaz parfaits avec $B_\alpha = 0$ et $\gamma_\alpha = c_{p,\alpha}/c_{v,\alpha}$. Pour l'eau, différentes valeurs de γ et B sont rencontrées dans la littérature [20, 88]. Cependant, elles ne permettent pas toutes d'obtenir une estimation correcte pour la vitesse du son c dans l'eau définie comme $c = \sqrt{\gamma(p + B)/\rho}$. Coralic et Colonius [20] proposent par exemple d'utiliser les valeurs $\gamma = 6.12$ et $B = 3.43 \times 10^8$ Pa fournissant une vitesse du son à pression atmosphérique de 1450 m.s^{-1} .

Afin d'obtenir l'équation d'état pour l'écoulement liquide-gaz, l'équation (2.34) est multipliée par la fraction volumique ϕ_α puis sommée sur α . Elle devient

$$\sum_\alpha \phi_\alpha \rho_\alpha e_\alpha = \sum_\alpha \phi_\alpha \frac{p_\alpha}{(\gamma_\alpha - 1)} + \sum_\alpha \phi_\alpha \frac{\gamma_\alpha B_\alpha}{(\gamma_\alpha - 1)}. \quad (2.35)$$

D'après la relation (2.1) et en supposant que la pression est constante, soit $p = p_\alpha$, l'équation d'état raidie pour un écoulement diphasique

$$\rho e = \frac{p + \gamma B}{(\gamma - 1)}, \quad (2.36)$$

est alors obtenue, où les quantités $1/(\gamma - 1)$ et $\gamma B/(\gamma - 1)$ sont

$$\frac{1}{(\gamma - 1)} = \sum_\alpha \frac{\phi_\alpha}{(\gamma_\alpha - 1)} \quad \text{et} \quad \frac{\gamma B}{(\gamma - 1)} = \sum_\alpha \phi_\alpha \frac{\gamma_\alpha B_\alpha}{(\gamma_\alpha - 1)}. \quad (2.37)$$

2.3.2 Équations permettant de décrire une interface liquide-gaz

Il a précédemment été montré que l'équation (2.39) est valable pour un milieu constitué de gaz parfaits. Dans le cas d'un écoulement contenant un liquide et un gaz, Saurel *et al.* [89] utilisent l'équation d'advection de la fraction massique d'un des fluides Y_α :

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_\alpha) = 0. \quad (2.38)$$

Cependant, cette méthode ne permet pas directement de déterminer la pression de l'écoulement car les paramètres γ et B sont inconnus. La pression est alors obtenue en résolvant un polynôme d'ordre deux dont l'expression est déduite de l'équation d'état raidie et des lois de

Maxwell [63, 89]. De plus, l'utilisation de cette équation d'advection conduit à l'apparition d'oscillations de pression à l'interface entre deux fluides à vitesse et pression constante.

Une autre méthode proposée par Beig et Johnsen [8] consiste à résoudre directement une équation d'advection de la fraction volumique d'un des deux fluides. Cette équation contient un terme source proportionnel à la divergence du vecteur vitesse permettant de tenir compte des effets de compression et d'éviter la formation d'oscillations numériques à l'interface. Pour un fluide 1, elle est égale à :

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_1 = \left(\frac{\phi_1 \phi_2 (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2)}{(\phi_1 \rho_2 c_2^2 + \phi_2 \rho_1 c_1^2)} \right) \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (2.39)$$

où c_1 et c_2 sont les vitesses du son dans les fluides 1 et 2.

Dans la présente étude, la méthode de Shyue [94] qui consiste à résoudre l'équation (2.39) associée à une équation supplémentaire afin d'empêcher la création d'oscillations numériques est considérée. Ces équations sont obtenues en considérant un écoulement simple constitué de deux fluides à vitesse, pression et température uniformes [94]. Dans ces conditions, les gradients de pression, de vitesse et de température sont nuls. Par conséquent, l'équation d'évolution de l'énergie totale du système (2.2) est simplifiée sous la forme

$$\frac{\partial E}{\partial t} + u_i \frac{\partial E}{\partial x_i} = 0.$$

A l'aide de l'expression $E = \rho e + 1/2 \rho \mathbf{u}^2$ et de l'équation d'état (2.36), l'équation précédente devient

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p + \gamma B}{\gamma - 1} \right) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{p + \gamma B}{\gamma - 1} \right) + \frac{u_j u_j}{2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right) = 0.$$

En utilisant l'équation de conservation de la masse dans le cas d'une vitesse uniforme s'écrivant $\partial \rho / \partial t + u_i \partial \rho / \partial x_i = 0$, on obtient,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p + \gamma B}{\gamma - 1} \right) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{p + \gamma B}{\gamma - 1} \right) = 0.$$

L'équation précédente peut alors s'écrire de la façon suivante :

$$p \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) = 0.$$

Cette dernière expression est valable quel que soit p . Ceci implique que les deux équations

suivantes doivent être vérifiées [94] :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) = 0 \end{cases} \quad (2.40)$$

La fraction volumique est donc directement déduite en utilisant les relations (2.37) et la pression est déterminée à l'aide des quantités $1/(\gamma - 1)$ et $\gamma B/(\gamma - 1)$ à l'aide de l'équation d'état raidie :

$$p = \frac{1}{1/(\gamma - 1)} \left(E - \frac{1}{2} \rho u^2 - \frac{\gamma B}{(\gamma - 1)} \right).$$

Il reste alors à estimer la température. Pour cela, Massoni *et al.* [67] et Nagrath *et al.* [69] ont proposé d'utiliser une équation d'état reliant l'énergie interne à la température au sein d'écoulements liquide-gaz. Celle-ci s'écrit :

$$e = c_v T \quad (2.41)$$

où e est l'énergie interne massique et T est la température. La capacité calorifique à volume constant c_v est différente selon le fluide considéré, et est supposée constante au sein de chaque fluide. Cette équation a été utilisée par Massoni *et al.* [67] pour la simulation d'écoulements liquide-gaz non visqueux et par Nagrath *et al.* [69] afin de simuler l'implosion d'une bulle d'air dans l'eau en incluant les effets de viscosité. Une autre méthode proposée par Can et Prosperetti [16] consiste à résoudre une équation sur la température dans laquelle seuls les flux conductifs sont inclus. Elle permet d'estimer la température au sein de l'eau et de la vapeur afin de d'estimer la quantité de fluide changeant de phase à l'interface. Cette équation est exprimée par :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \lambda \nabla^2 T \quad (2.42)$$

où la conductivité thermique λ est constante au sein de chacun des fluides. Récemment, Beig et Johnsen [8] ont développé une méthode permettant de simuler des écoulements diphasiques compressibles et visqueux en prenant en compte les flux de conductivité thermique. Dans cette méthode, l'équation d'état suivante est utilisée :

$$\rho e = \rho c_v T + B \quad (2.43)$$

où B est une constante caractéristique du fluide permettant de relier la pression à l'énergie interne à l'aide de l'équation d'état raidie. Beig et Johnsen [8] ont alors montré que des oscillations numériques sur la température apparaissaient à l'interface entre deux fluides à tempé-

rature constante. Pour corriger cela, le même raisonnement que celui proposé par Shyue [94] afin d'éviter la création d'oscillations de pression à l'interface est utilisé. Il s'agit de supposer l'advection d'une interface liquide-gaz à vitesse, pression et température constante. Ainsi, pour que la température reste constante et soit continue au passage de l'interface, au moins deux équations supplémentaires doivent être résolues. Elles s'écrivent [8] :

$$\begin{cases} \frac{\partial B}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla B = 0 \\ \frac{\partial \rho c_v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} c_v) = 0 \end{cases} \quad (2.44)$$

Dans le cadre de cette thèse, la température est estimée à l'aide d'une équation obtenue à partir de l'équation d'évolution de l'énergie interne et de relations thermodynamiques [6]. Cette équation permet d'estimer la température partout dans le domaine de calcul, quel que soit le fluide considéré et en tenant compte des effets de compressibilité, de frottement visqueux et de conduction thermique. La forme non conservative de cette équation est exprimée par

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \beta T \frac{Dp}{Dt} + 2\mu \epsilon_{ij} \epsilon_{ij} + \left(\mu_v - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 - \nabla \cdot \mathbf{q}, \quad (2.45)$$

et la forme conservative par

$$c_p \left[\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) \right] = \beta T \frac{Dp}{Dt} + 2\mu \epsilon_{ij} \epsilon_{ij} + \left(\mu_v - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 - \nabla \cdot \mathbf{q}, \quad (2.46)$$

où l'opérateur D/Dt est la dérivée particulaire, $\epsilon_{ij} = 1/2 (\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u})$ est le tenseur des déformations et β est la dilatation thermique de l'écoulement telle que $\beta = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \beta_{\alpha}$. Le premier terme du membre de droite de cette équation correspond aux changements de température dus à la dilatation thermique du fluide β liée aux variations de pression. Les deux termes suivant traduisent une augmentation de température par viscosité suite à la déformation et à la compression du fluide. Enfin, le dernier terme représente les flux de température par conduction. Le calcul de la température au sein d'écoulements diphasiques sera validé à l'aide de deux cas tests monodimensionnels dans le chapitre 4.

Il reste à déterminer la capacité calorifique de l'écoulement c_p . Ne connaissant pas la fraction massique, il n'est pas possible d'utiliser la relation $c_p = \sum_{\alpha} Y_{\alpha} c_{p,\alpha}$. Par conséquent, la méthode proposée par Beig et Johnsen [8] consistant à résoudre une équation d'advection de la capacité calorifique à volume constant est utilisée. Ainsi, la capacité calorifique à

pression constante c_p est obtenue à l'aide de l'équation suivante :

$$\frac{\partial \rho c_p}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i c_p}{\partial x_i} = 0 . \quad (2.47)$$

Le système d'équations utilisé dans la présente étude pour la simulation des écoulements liquide-gaz, compressibles, visqueux et conductifs, est donc le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 , \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} , \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial u_i E}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i \sigma_{ij}) - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} , \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) = 0 , \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) = 0 , \\ \frac{\partial \rho T}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i T}{\partial x_i} = \frac{\beta T}{c_p} \frac{Dp}{Dt} + \frac{2\mu}{c_p} \epsilon_{ij} \epsilon_{ij} + \frac{1}{c_p} \left(\mu_v - \frac{2}{3} \mu \right) \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right)^2 - \frac{1}{c_p} \frac{\partial q_i}{\partial x_i} , \\ \frac{\partial \rho c_p}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i c_p}{\partial x_i} = 0 . \end{array} \right. \quad (2.48)$$

Dans le cadre de cette étude, une fine zone de transition existe entre les deux fluides. Celle-ci peut être interprétée comme étant l'ensemble des différentes positions possibles d'une interface fine obtenues au cours d'un grand nombre de réalisations de l'écoulement. Par conséquent, la fraction volumique d'un des deux fluides correspondrait alors à la probabilité qu'un point dans l'écoulement se trouve dans ce fluide. Ainsi, l'équation sur la masse volumique (2.48), par exemple, peut aussi s'écrire pour la moyenne de la masse volumique calculée sur un grand nombre de réalisations d'un écoulement.

3 Méthodes numériques

Afin de résoudre le système d'équations (2.2), différentes méthodes numériques sont utilisées dans le cadre de cette thèse. Ces méthodes sont explicites, d'ordres élevés, conservatives et produisent de faibles erreurs de dissipation et de dispersion. Elles ont précédemment été développées pour l'aéroacoustique [9, 10] et ont été employées afin de simuler divers écoulements compressibles turbulents [59, 66]. Plusieurs jets turbulents ont été calculés, notamment des jets subsoniques à différents nombre de Reynolds [13], un jet sur-détendu à Mach 3.3 [25] et des jets ronds supersoniques impactant une plaque plane [11]. L'un des travaux de la thèse a consisté à montrer que ces méthodes sont adaptées à la simulation d'écoulements diphasiques. Les méthodes d'avancement temporel et de différenciation spatiale, ainsi que le filtrage spatial sélectif sont identiques à ceux déjà disponibles. Cependant, la méthode de capture de choc [10] a été modifiée afin de capturer des chocs et des interfaces déformables au sein d'un même écoulement.

3.1 Différenciation spatiale

Les méthodes de différenciation spatiale permettent de calculer les dérivées partielles spatiales. Pour une variable $U = (\rho, \rho \mathbf{u}, E, 1/(\gamma - 1), \gamma B/(\gamma - 1))$, la dérivée spatiale au point x_0 , dans la direction x , est estimée de la façon suivante :

$$\frac{\partial U}{\partial x}(x_0) = \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=-N}^N a_j U(x_0 + j\Delta x), \quad (3.1)$$

où Δx est la dimension d'une cellule du maillage. Le schéma utilisé dans cette étude est centré. Ainsi, ses coefficients sont tels que $a_j = -a_{-j}$, et il n'introduit donc pas de dissipation. Dans le cas de schémas aux différences finies standards, les coefficients a_j sont obtenus en annulant les termes de la série de Taylor de l'expression (3.1) de façon à atteindre un

schéma d'ordre le plus élevé possible. Les coefficients a_j du schéma utilisé dans cette étude ont été déterminés de façon à minimiser l'erreur de dispersion sur une gamme donnée de nombres d'ondes. Pour cela, une transformée de Fourier a été appliquée à l'expression (3.1). Le nombre d'onde effectif k^* du schéma est alors donné par la relation

$$k^* \Delta x = 2 \sum_{j=1}^N a_j \sin(jk\Delta x).$$

L'erreur de dispersion est définie comme la différence entre ce nombre d'onde effectif k^* et le nombre d'onde exact k , et est définie par $|k^* \Delta x - k \Delta x|/\pi$. Ici, un schéma optimisé centré sur onze points d'ordre quatre est utilisé [9]. Les coefficients a_j de ce schéma sont donnés en annexe A.1 dans le tableau A.1.

Sur la figure 3.1, les erreurs de dispersion du présent schéma optimisé et d'un schéma aux différences finies standard centré sur onze points d'ordre dix sont tracées en fonction du nombre d'onde normalisé $k\Delta x$. Ces quantités sont représentées à l'aide d'échelles logarithmiques. L'erreur de dispersion du schéma optimisé d'ordre quatre est inférieure à celle du schéma d'ordre dix pour des nombres d'ondes $k\Delta x > \pi/4$. De plus, le schéma optimisé introduit une erreur de dispersion inférieure à 10^{-4} pour $k\Delta x \lesssim \pi/2$. La dispersion du schéma optimisé est donc faible pour des ondes discrétisées par plus de quatre points par longueur d'onde.

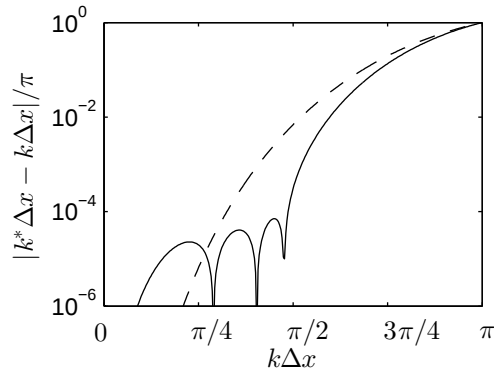


FIGURE 3.1 – Représentation de l'erreur de dispersion des schémas aux différences finies centrés sur 11 points --- standard d'ordre 10 et — optimisé d'ordre 4 [9], en fonction du nombre d'onde normalisé $k\Delta x$.

3.2 Intégration temporelle

Concernant l'intégration temporelle, un schéma de Runge-Kutta introduisant de faibles erreurs de dissipation et de dispersion est utilisé [9]. Cet algorithme est explicite et d'ordre

deux. L'avancement temporel de la variable U d'un instant n à un instant $n + 1$ séparés d'un pas de temps Δt est effectué en six étapes de la façon suivante :

$$U^{n+1} = U^n + \sum_{j=1}^6 \gamma_j \Delta t^j \frac{\partial^j U^n}{\partial t^j},$$

où les coefficients γ_j de l'algorithme sont donnés en annexe A.1, dans le tableau A.3.

La dissipation et la dispersion introduites à chaque itération sont obtenues à partir du facteur d'amplification G de l'algorithme

$$G(\omega \Delta t) = 1 + \sum_{j=1}^6 \gamma_j (i\omega \Delta t)^j, \quad (3.2)$$

où ω est la fréquence angulaire. Le facteur d'amplification exact s'écrit $G_{ex}(\omega \Delta t) = e^{i\omega \Delta t}$. Afin de déterminer l'erreur de dissipation et de dispersion de l'algorithme optimisé, le rapport des facteurs d'amplification effectif et exact est alors calculé, soit

$$\frac{G(\omega \Delta t)}{G_{ex}(\omega \Delta t)} = |G(\omega \Delta t)| e^{i(\omega \Delta t - \omega^* \Delta t)}.$$

La dissipation est alors égale à $1 - |G(\omega \Delta t)|$, où $|G(\omega \Delta t)|$ est le taux d'amplification. L'erreur de dispersion due à l'algorithme à chaque itération est définie comme le déphasage normalisé $|\omega \Delta t - \omega^* \Delta t|/\pi$, où ω^* est la fréquence angulaire effective.

Afin de comparer la précision de cet algorithme et de l'algorithme de Runge-Kutta standard d'ordre 4, dont les coefficients sont donnés dans l'annexe A.1, les erreurs de dissipation et de dispersion de ces deux schémas sont représentées sur la figure 3.2. Elles sont tracées en fonction de la pulsation normalisée $\omega \Delta t$, pour $\pi/8 \leq \omega \Delta t \leq \pi$. Pour cette gamme de pulsations, le schéma optimisé est nettement moins dissipatif que le schéma standard. L'erreur de dispersion de l'algorithme optimisé est également plus faible que celle de l'algorithme standard.

3.3 Filtrage sélectif

L'utilisation de schémas aux différences finies centrés pour la différenciation spatiale présente un inconvénient. En effet, les schémas aux différences finies centrés sont non dissipatifs. Ainsi, des oscillations maille à maille dont la longueur d'onde vaut deux fois la dimension d'une maille sont susceptibles de se propager, ce qui peut engendrer des instabilités numériques. L'application d'un filtrage sélectif permet de supprimer ces oscillations sans affecter de façon significative les grandes longueurs d'onde.

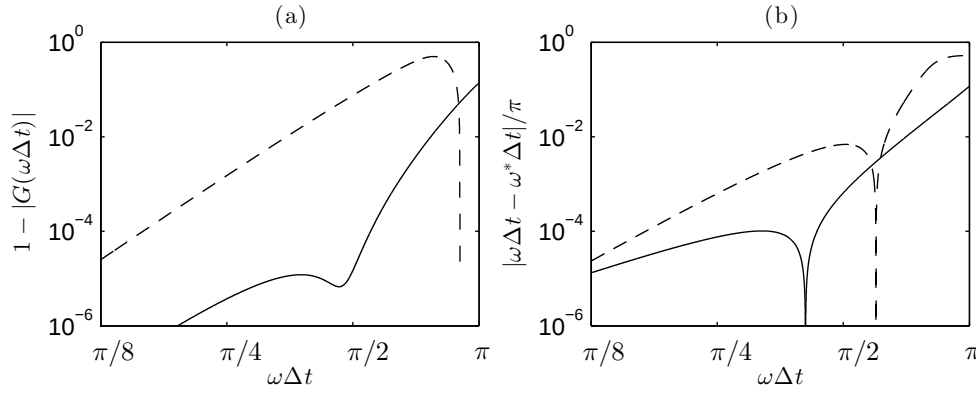


FIGURE 3.2 – Représentation des erreurs de (a) dissipation et de (b) dispersion des schémas de Runge-Kutta --- standard en 4 étapes et — optimisé en 6 étapes, en fonction de la pulsation normalisée $\omega\Delta t$ [9].

Le filtre spatial utilisé ici est explicite, d'ordre six et centré sur onze points [10]. Il est appliqué à chaque itération aux variables $U = (\rho, \rho\mathbf{u}, E, 1/(\gamma - 1), \gamma B/(\gamma - 1))$ tel que :

$$U_i^{fs} = U_i - \sigma^{fs} D_i^{fs} \quad \text{avec} \quad D_i^{fs} = \sum_{j=-5}^5 d_j U_{i+j}, \quad (3.3)$$

où σ^{fs} est l'intensité du filtrage sélectif. La procédure de filtrage est conservative tant que l'intensité est constante [56]. Dans cette étude, elle est fixée à $\sigma^{fs} = 1$. De cette façon les oscillations maille à maille sont complètement dissipées à chaque application du filtrage. Les coefficients d_j du filtre, rapportés en annexe A.1 dans le tableau A.2, sont tels que $d_j = d_{-j}$. Le filtrage n'introduit donc pas d'erreur de dispersion. La méthode standard permettant de déterminer les coefficients d_j consiste à annuler les termes de la série de Taylor de l'expression (3.3). Les coefficients du filtre utilisé dans cette étude ont été obtenus à l'aide de la transformée de Fourier de l'expression (3.3) [10]. La fonction de transfert de ce filtre, en fonction du nombre d'onde normalisé $k\Delta x$, s'écrit en effet

$$D(k\Delta x) = d_0 + 2 \sum_{j=1}^5 d_j \cos(jk\Delta x). \quad (3.4)$$

Cette fonction fournit la dissipation du filtre en fonction du nombre d'onde. Elle est représentée à l'aide d'échelles logarithmiques sur la figure 3.3. Pour $k\Delta x = \pi$, la dissipation du filtre est égale à 1. Ainsi, les oscillations discrétisées par deux points par longueur d'onde sont totalement supprimées suite à l'application du filtre. De plus, la dissipation est très faible lorsque $k\Delta x \leq \pi/3$. Le filtrage sélectif permet ainsi de dissiper les oscillations hautes fréquences sans affecter de façon notable les grandes longueurs d'onde. Ce filtre sélectif est donc adapté au filtrage des oscillations maille à maille.

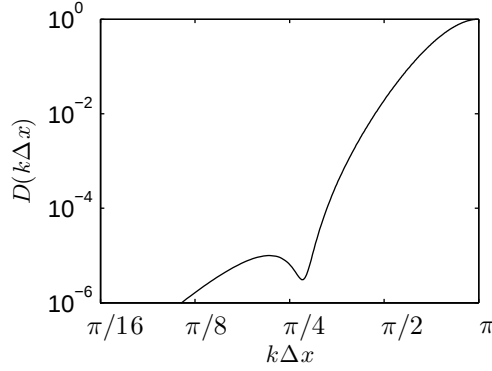


FIGURE 3.3 – Représentation de la fonction de transfert du filtre sélectif explicite centré sur 11 points d'ordre 6 [9], en fonction du nombre d'onde normalisé $k\Delta x$.

3.4 Méthode de capture des discontinuités

Une procédure de capture des discontinuités est mise en œuvre afin de capturer les différentes singularités au sein des écoulements diphasiques telles qu'une onde de choc ou une interface déformable. Pour cela, l'un des travaux de la thèse a consisté à modifier une procédure de capture de chocs développée pour l'aéroacoustique [10]. Cette procédure initiale s'appuie sur l'utilisation d'un détecteur de choc et d'un filtre spatial d'intensité variable. Elle est complétée ici d'un détecteur supplémentaire et de deux indicateurs de monotonie.

3.4.1 Filtrage des discontinuités

L'intensité du filtrage des discontinuités σ^{fd} est estimée à partir de variables de l'écoulement de façon à être importante autour de forts gradients et négligeable partout ailleurs. Afin de localiser les oscillations numériques formées autour des discontinuités, deux détecteurs de chocs r_ρ et r_p sont évalués à partir de la masse volumique ρ et de la pression p , respectivement [10]. Ils sont estimés de la même manière. Ainsi, seul le calcul de r_ρ est détaillé ci-dessous.

Dans un premier temps, les composantes hautes fréquences du signal de la masse volumique sont extraites au point i de la façon suivante :

$$D\rho_i = \frac{1}{4} (-\rho_{i+1} + 2\rho_i - \rho_{i-1}).$$

L'énergie de ces composantes est ensuite estimée par

$$D\rho_i^{mag} = \frac{1}{4} ((D\rho_{i+1})^2 + 2(D\rho_i)^2 + (D\rho_{i-1})^2).$$

Le détecteur r_ρ est alors défini comme le rapport de cette énergie sur l'énergie locale de la

masse volumique, soit

$$r_\rho = \frac{D\rho_i^{magn}}{\rho_i^2}. \quad (3.5)$$

Le détecteur r_ρ permet d'identifier la présence de fortes variations dans le signal de la masse volumique. Il prend des valeurs élevées lorsque des oscillations apparaissent autour d'une interface fluide-fluide, d'une discontinuité de contact ou d'une onde de choc. Par ailleurs, le détecteur r_p calculé à partir de la pression permet de capturer des ondes de raréfaction et des ondes de chocs qui se traduisent par un gradient plus important sur le signal de la pression que sur le signal de la masse volumique.

Le détecteur r_ρ étant connu, la valeur de l'intensité du filtrage de capture de discontinuités σ_ρ^{fd} peut être déterminée. Celle-ci est définie de façon à être proche de 1 lorsqu'un fort gradient est détecté, soit lorsque la valeur r_ρ est grande, et nulle en l'absence de discontinuité, lorsque r_ρ est faible. De la même façon, une intensité de filtrage σ_p^{fd} est estimée à partir du détecteur r_p basé sur la pression. Au nœud i , l'intensité σ_ρ^{fd} est évaluée à l'aide de la relation

$$\sigma_{\rho_i}^{fd} = \frac{1}{2} M_{\rho_i} \times \left(1 - \frac{r_{th}}{r_{\rho_i} + \epsilon} + \left| 1 - \frac{r_{th}}{r_{\rho_i} + \epsilon} \right| \right), \quad (3.6)$$

où $\epsilon = 10^{-16}$ permet d'éviter un dénominateur nul, $r_{th} = 2 \times 10^{-5}$ est une valeur seuil telle que $\sigma_{\rho_i}^{fd} = 0$ lorsque $r_{\rho_i} \leq r_{th}$ et $\sigma_{\rho_i}^{fd} > 0$ pour $r_{\rho_i} > r_{th}$. Ainsi, le filtrage de capture des discontinuités est appliqué uniquement quand l'écoulement présente de forts gradients. Enfin, M_{ρ_i} est un terme permettant d'annuler l'intensité du filtrage σ_ρ^{fd} en l'absence d'oscillation numérique. Il est estimé à partir de l'étude du caractère monotone de la masse volumique autour du point i . Il sera par conséquent appelé indicateur de monotonie et sera détaillé à la section 3.4.2. Par construction, on impose $0 \leq M_{\rho_i} \leq 1$ et $0 \leq \sigma_\rho^{fd} \leq 1$. De la même manière, un indicateur de monotonie M_p est estimé à l'aide de la pression et permet de calculer l'intensité de filtrage σ_p^{fd} .

Enfin, l'intensité globale du filtrage des discontinuités est définie comme le maximum des intensités estimées sur la masse volumique et sur la pression, soit $\sigma^{fd} = \max(\sigma_\rho^{fd}, \sigma_p^{fd})$. Afin d'appliquer le filtrage sous forme conservative [56], les valeurs de σ^{fd} entre les points du maillage, en $i + \frac{1}{2}$ et $i - \frac{1}{2}$, sont approchées par

$$\sigma_{i+\frac{1}{2}}^{fd} = \frac{1}{2} \left(\sigma_{i+1}^{fd} + \sigma_i^{fd} \right) \quad \text{et} \quad \sigma_{i-\frac{1}{2}}^{fd} = \frac{1}{2} \left(\sigma_i^{fd} + \sigma_{i-1}^{fd} \right).$$

L'intensité du filtrage étant connue, les variables $U = (\rho, \rho \mathbf{u}, E, 1/(\gamma - 1), \gamma B/(\gamma - 1))$ sont

ensuite filtrées. Au nœud i , le filtrage de U s'écrit

$$U_i^{fd} = U_i - \left(\sigma_{i+\frac{1}{2}}^{fd} D_{i+\frac{1}{2}}^{fd} - \sigma_{i-\frac{1}{2}}^{fd} D_{i-\frac{1}{2}}^{fd} \right), \quad (3.7)$$

$$\text{avec } D_{i+\frac{1}{2}}^{fd} = \sum_{j=1-n}^n c_j U_{i+j} \quad \text{et} \quad D_{i-\frac{1}{2}}^{fd} = \sum_{j=1-n}^n c_j U_{i+j-1}, \quad (3.8)$$

où c_j sont les coefficients du filtre.

L'effet du filtrage des discontinuités peut être étudié dans l'espace de Fourier en considérant la forme conservative (3.7) pour une intensité de filtrage variable $\sigma_{i+\frac{1}{2}}^{fd} = \sigma_i^{fd} + \Delta\sigma_i^{fd}$ et $\sigma_{i-\frac{1}{2}}^{fd} = \sigma_i^{fd} - \Delta\sigma_i^{fd}$. L'intensité σ_i^{fd} est comprise entre 0 et 1 donc la variation de l'intensité du filtrage $\Delta\sigma_i^{fd}$ prend des valeurs telles que $-0.5 \leq \Delta\sigma_i^{fd} \leq 0.5$. Ainsi l'équation (3.7) devient

$$U_i^{fd} = U_i - \sigma_i^{fd} \left(D_{i+\frac{1}{2}}^{fd} - D_{i-\frac{1}{2}}^{fd} \right) - \Delta\sigma_i^{fd} \left(D_{i+\frac{1}{2}}^{fd} + D_{i-\frac{1}{2}}^{fd} \right).$$

En substituant $D_{i+\frac{1}{2}}^{fd}$ et $D_{i-\frac{1}{2}}^{fd}$ à l'aide des relations (3.8), l'équation précédente s'écrit

$$\begin{aligned} U_i^{fd} = & U_i - \sigma_i^{fd} \left(c_n U_{i+n} + \sum_{j=1-n}^{n-1} (c_j - c_{j+1}) U_{i+j} - c_{1-n} U_{i-n} \right) \\ & - \Delta\sigma_i^{fd} \left(c_n U_{i+n} + \sum_{j=1-n}^{n-1} (c_j + c_{j+1}) U_{i+j} + c_{1-n} U_{i-n} \right). \end{aligned}$$

Afin d'annuler l'erreur de dispersion dans le cas où $\Delta\sigma_i^{fd} = 0$, le filtre doit être calculé à partir de coefficients symétriques, soit $c_n = -c_{1-n}$ et $c_j - c_{j+1} = c_{-j} - c_{1-j}$. Ainsi, les coefficients de la fonction de dissipation sont antisymétriques avec $c_j = -c_{1-j}$ et l'équation précédente s'écrit alors :

$$\begin{aligned} U_i^{fd} = & U_i - \sigma_i^{fd} \left(-2c_1 U_i + \sum_{j=1}^{n-1} (c_j - c_{j+1}) (U_{i+j} + U_{i-j}) + c_n (U_{i+n} + U_{i-n}) \right) \\ & - \Delta\sigma_i^{fd} \left(\sum_{j=1}^{n-1} (c_j + c_{j+1}) (U_{i+j} - U_{i-j}) + c_n (U_{i+n} - U_{i-n}) \right). \end{aligned} \quad (3.9)$$

En appliquant la transformée de Fourier spatiale à l'équation (3.9), celle-ci devient :

$$\widehat{U}_i^{fd} = \widehat{U}_i \left(1 - \sigma_i^{fd} D_{real}(k\Delta x) + i\Delta\sigma_i^{fd} D_{imag}(k\Delta x) \right), \quad (3.10)$$

où $D_{real}(k\Delta x)$ est la fonction de transfert du filtre obtenue pour une intensité σ^{fd} constante et $D_{imag}(k\Delta x)$ est la fonction de transfert de l'erreur de phase due aux variations de l'intensité $\Delta\sigma_i^{fd}$. Ces deux quantités sont définies de la façon suivante :

$$\begin{cases} D_{real}(k\Delta x) = -2c_1 + 2 \sum_{j=1}^{n-1} (c_j - c_{j+1}) \cos(jk\Delta x) + 2c_n \cos(nk\Delta x), \\ D_{imag}(k\Delta x) = -2 \sum_{j=1}^{n-1} (c_j + c_{j+1}) \sin(jk\Delta x) - 2c_n \sin(nk\Delta x). \end{cases} \quad (3.11)$$

Dans ce travail, le filtre utilisé pour dissiper les oscillations de Gibbs créées autour des discontinuités est un filtre d'ordre deux standard pour lequel $n = 2$, $c_1 = -1/4$ et $c_2 = 0$. Les fonctions de dissipation et de dispersion de ce filtre sont représentées sur la figure 3.4 en fonction du nombre d'onde normalisé $k\Delta x$. La dissipation du filtre est supérieure à 10^{-2} pour des nombres d'ondes supérieurs à $\pi/16$, et elle est égale à 1 pour $k\Delta x = \pi$. Ainsi, les oscillations discrétisées par deux points par longueur d'onde sont supprimées suite à l'application du filtre pour $\sigma^{fd} = 1$. La dispersion de ce filtre est relativement élevée et est nulle pour $k\Delta x = 0$ et $k\Delta x = \pi$. D'après l'équation (3.10) cette erreur apparaît lorsque la variation d'intensité du filtrage $\Delta\sigma^{fd}$ est non nulle. Il est donc important de limiter cette variation afin de conserver des solutions numériques précises.

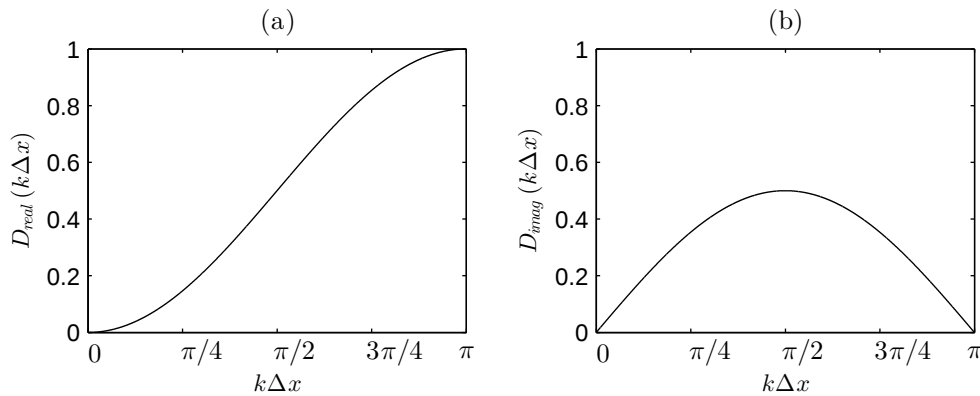


FIGURE 3.4 – Représentation des erreurs de (a) dissipation et de (b) dispersion du filtre d'ordre 2 utilisé dans la procédure de capture des discontinuités, en fonction du nombre d'onde normalisé $k\Delta x$.

Afin d'illustrer l'efficacité de la procédure de capture des discontinuités, un cas test monodimensionnel est résolu. Il porte sur la propagation d'une onde de pression non linéaire dans l'air [101]. Les conditions imposées au temps initial correspondent à une impulsion de

pression de forte amplitude, de forme gaussienne centrée en l'abscisse $x = 0$, telles que

$$u = 0.5 \exp \left[-\ln(2) \left(\frac{x}{5} \right)^2 \right], \quad p = \frac{1}{\gamma} \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} u \right)^{2\gamma/(\gamma-1)} \quad \text{et} \quad \rho = \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} u \right)^{2/(\gamma-1)}. \quad (3.12)$$

Le problème est résolu à l'aide des équations d'Euler. Le fluide considéré est de l'air avec $\gamma = 1.4$. Pour la résolution numérique, un maillage uniforme dont les mailles ont pour taille $\Delta x = 1$ est utilisé. Le pas de temps entre deux itérations vaut $\Delta t = 0.8$, et le calcul est effectué jusqu'au temps final $t = 200$. Les distributions de pression aux temps initial et final sont présentées sur les figures 3.5(a) et 3.5(b). Les solutions sont calculées avec et sans la procédure de capture des discontinuités, respectivement. Dans les deux cas, une onde de choc est observée en $x \simeq 248\Delta x$ au temps $t = 200$. Ceci est en accord avec les solutions de référence issues du CAA Workshop [101]. Lorsque le cas test est résolu sans la procédure de capture des discontinuités, des oscillations de Gibbs sont créées de part et d'autre de ce choc. En revanche, l'utilisation de cette procédure permet de dissiper les oscillations tout en propageant l'onde de choc avec précision sans affecter la solution loin de la discontinuité. De plus, l'onde de choc est discrétisée par seulement quatre points du maillage.

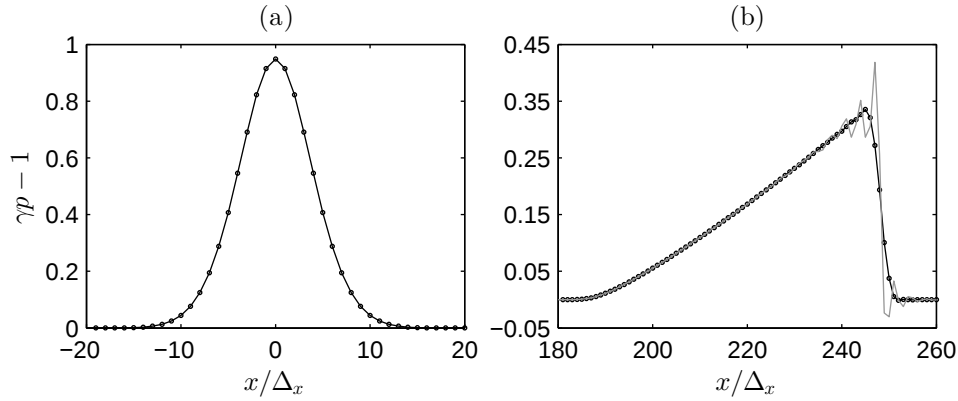


FIGURE 3.5 – Propagation d'une onde de pression non linéaire dans l'air. Représentation de $\gamma p - 1$ aux instants (a) $t = 0$ et (b) $t = 200$. Solutions obtenues — sans et — avec la procédure de capture des discontinuités; • points du maillage.

3.4.2 Indicateurs de monotonie

L'indicateur de monotonie M_ρ présent dans l'expression (3.6) est utilisé afin d'empêcher le filtrage des discontinuités de s'appliquer en l'absence d'oscillation. En effet, en présence de forts gradients au sein de l'écoulement, ce filtrage peut être appliqué inutilement. Ceci est dû au fait que les détecteurs sont définis comme le rapport des énergies hautes fréquences sur l'énergie locale. Par conséquent, si le gradient est fort mais la valeur locale faible, les

détecteurs risquent d'être plus élevé que le seuil r_{th} , et ceci même en l'absence d'oscillation. Pour corriger cela, deux indicateurs sont introduits dans le calcul de l'intensité du filtrage des discontinuités. Les indicateurs M_ρ et M_p sont estimés à partir du caractère monotone du signal de la masse volumique et de la pression, respectivement. Ils sont calculés exactement de la même façon. Seul le calcul de M_ρ est donc détaillé ici.

Le caractère monotone de la masse volumique est évalué sur un échantillon S de trois points, $S = \{i-1, i, i+1\}$. Dans un premier temps, deux variables D^G et D^D , respectivement les variations de masse volumique à gauche et à droite du nœud i , sont définies par

$$D_i^G = \rho_i - \rho_{i-1} \quad \text{et} \quad D_i^D = \rho_{i+1} - \rho_i.$$

Le produit de ces deux variables présente alors les propriétés suivantes :

$$\begin{cases} D_i^G D_i^D < 0 & \text{si } \rho \text{ possède un extremum au point } i, \\ D_i^G D_i^D \geq 0 & \text{si } \rho \text{ est monotone sur } S. \end{cases}$$

Une variable ξ est estimée au nœud i , comme

$$\xi_i = |D_i^D D_i^G| - D_i^D D_i^G, \quad (3.13)$$

avec, par conséquent,

$$\begin{cases} \xi_i > 0 & \text{si } \rho \text{ possède un extremum au point } i, \\ \xi_i = 0 & \text{si } \rho \text{ est monotone sur } S. \end{cases}$$

D'après l'équation (3.10), l'erreur de dispersion du filtrage des discontinuités est directement liée à la variation spatiale de l'intensité $\Delta\sigma^{fd}$ [10]. Par conséquent, afin de réduire cette erreur, la variable ξ est moyennée sur cinq points du maillage telle que,

$$\bar{\xi}_i = \frac{1}{5} \sum_{j=-2}^2 \xi_{i+j}. \quad (3.14)$$

Le nombre de points choisi pour calculer la moyenne est justifié à l'aide d'un cas test monodimensionnel résolu au chapitre suivant. Enfin, l'indicateur de monotonie est défini, au point i , comme

$$M_{\rho_i} = \frac{\bar{\xi}_i}{\bar{\xi}_i + \rho_i^2 \epsilon}, \quad (3.15)$$

où $\epsilon = 10^{-16}$ permet d'éviter un dénominateur nul. L'indicateur présente alors les propriétés

suivantes :

$$\begin{cases} M_{\rho_i} = 0 & \text{si } \rho \text{ est monotone sur } S, \\ M_{\rho_i} \simeq 1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Il permet donc d'annuler l'intensité du filtrage des discontinuités σ_ρ^{fd} lorsque le signal de la masse volumique ne présente pas d'oscillation.

4 Validations des méthodes à l'aide de cas test monodimensionnels

Les équations ainsi que les méthodes numériques détaillées dans les chapitres 2 et 3 sont maintenant validées à l'aide de plusieurs cas test monodimensionnels dont les solutions analytiques ou de référence sont connues. Pour la simulation de l'ensemble des cas, les cinq équations du système (2.2) complétées de l'équation d'état raidie (2.36) sont résolues. L'algorithme utilisé est construit à partir du schéma aux différences finies centré sur onze points pour la différenciation spatiale, du filtrage sélectif supprimant les oscillations maille-à-maille, de la procédure de capture des discontinuités et de l'algorithme de Runge-Kutta en six étapes pour l'avancement temporel, présentés dans le chapitre 3.

4.1 Advection d'une interface gaz-gaz

4.1.1 Interface à faible gradient de masse volumique

Le premier cas test porte sur l'advection d'une interface entre deux gaz dont les vitesses et pressions sont constantes [47]. Ces conditions sont souvent rencontrées au sein d'écoulements diphasiques avant et après le passage d'une onde de pression à travers une interface. Dans un premier temps, ce cas est résolu afin de vérifier que l'algorithme permet de capturer une interface et afin de montrer l'intérêt des indicateurs de monotonie. Dans un second temps, l'objectif est d'étudier l'influence de l'équation d'advection de l'interface. Dans un troisième temps, le choix des variables filtrées est justifié. Enfin, l'effet du filtre et du seuil r_{th} utilisés lors de la procédure de capture des discontinuités est quantifié.

Les conditions imposées à l'instant initial sont les suivantes :

$$(\rho, u, p, \gamma, B) = \begin{cases} (1, 0.5, 1/1.4, 1.4, 0) & \text{si } x \leq 0, \\ (10, 0.5, 1/1.4, 1.2, 0) & \text{si } x > 0. \end{cases}$$

La masse volumique et le paramètre γ sont discontinus à l'interface, tandis que la pression et la vitesse sont uniformes. Les viscosités et conductivités thermiques des fluides sont nulles. Le problème est résolu à l'aide d'un maillage uniforme constitué de 100 mailles de dimension $\Delta x = 0.02$, comprises entre $x = -1$ et $x = 1$. Le domaine est périodique, et la solution est calculée jusqu'au temps $t = 4$ à l'aide d'un pas de temps $\Delta t = 0.016$. Ce temps correspond au temps nécessaire pour que l'interface, initialement en $x = 0$, soit advectée de la gauche vers la droite jusqu'à sa position initiale. A l'instant initial, la vitesse du son maximale est égale à $c = \sqrt{\gamma p / \rho} = 1$. Le nombre de Courant-Friedrich-Lewy (CFL) vaut alors $c\Delta t / \Delta x = 0.8$.

Validation des méthodes numériques et influence des indicateurs de monotonie

Les résultats obtenus à $t = 4$ pour la masse volumique et γ ainsi que les différences entre les solutions numériques et analytiques pour la vitesse et la pression, respectivement $u - u_0$ et $p - p_0$, sont présentés sur la figure 4.1. Les résultats numériques en noir et en gris sont obtenus avec et sans indicateur de monotonie. Les solutions analytiques sont représentés en pointillés noirs. Sans indicateur de monotonie, une forte dissymétrie est observée de part et d'autre de l'interface sur les profils de la masse volumique et de γ , sur les figures 4.1(a) et 4.1(d). En utilisant les indicateurs de monotonie, les solutions numériques sont par contre en bon accord avec les solutions analytiques. L'interface gaz-gaz est correctement propagée et discrétisée par seulement cinq points du maillage. Par ailleurs, les différences $u - u_0$ et $p - p_0$ montrées sur les figures 4.1(b) et 4.1(c) sont de l'ordre de 10^{-15} dans les deux cas. Les indicateurs n'ont donc pas d'influence notable sur la vitesse et la pression.

L'intensité du filtrage des discontinuités σ^{fd} au temps final estimée sans et avec indicateurs de monotonie est représentée sur les figure 4.2(a) et 4.2(b). Sans indicateur de monotonie, l'intensité est non nulle à gauche de l'interface tandis qu'aucune oscillation notable n'apparaît sur la masse volumique. En effet, la masse volumique locale ρ_i étant plus faible dans la région de gauche, le détecteur r_ρ est ici alors supérieur au seuil r_{th} . Par conséquent, les solutions sont fortement dissipées et ceci de façon asymétrique de part et d'autre de l'interface. Dans le cas où les indicateurs de monotonie sont employés, l'intensité du filtrage est non nulle uniquement en cinq points du maillage situés en $x \simeq -0.8$ et $x \simeq 0.9$. Les indicateurs de monotonie permettent par conséquent d'éviter l'application du filtre en

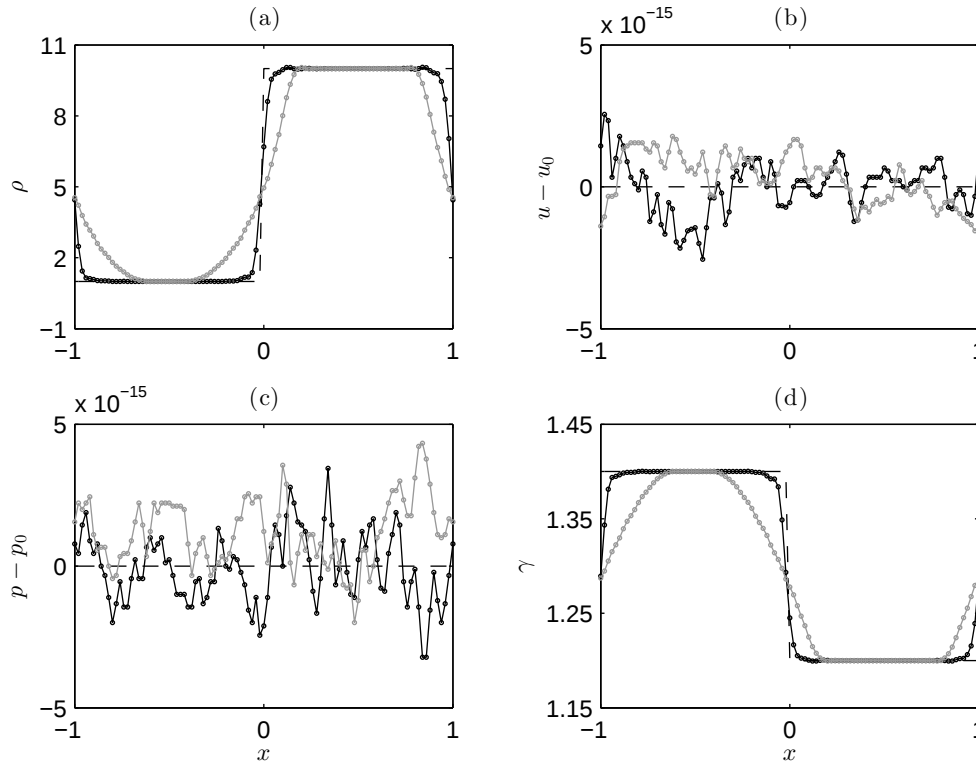


FIGURE 4.1 – Advection d'une interface gaz-gaz. Représentation à l'instant $t = 4$, (a) de la masse volumique, des différences (b) $u - u_0$ et (c) $p - p_0$ et (d) de γ obtenues — sans et — avec indicateurs de monotonie ; • points du maillage, --- solutions analytiques.

l'absence d'oscillation. De plus, l'intensité du filtrage est nulle à l'interface ce qui signifie qu'aucune oscillation notable n'est détectée à cet endroit à cet instant. La procédure de capture des discontinuités permet donc d'appliquer le filtre uniquement aux endroits où les oscillations de Gibbs sont significatives.

Influence de l'équation d'advection de l'interface

Afin de justifier le choix de l'équation permettant d'actualiser et de connaître la position de l'interface, le cas test est maintenant résolu en considérant l'équation d'advection d'une variable χ , écrite sous la forme non-conservative

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + u \frac{\partial \chi}{\partial x} = 0, \quad (4.1)$$

ou sous la forme conservative

$$\frac{\partial \rho \chi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \chi}{\partial x} = 0, \quad (4.2)$$

où χ est égal à γ ou à $1/(\gamma - 1)$.

Les différences à $t = 4$ entre les solutions numériques obtenues avec l'équation (4.1), et les solutions analytiques pour la vitesse et la pression sont présentées sur la figure 4.3.

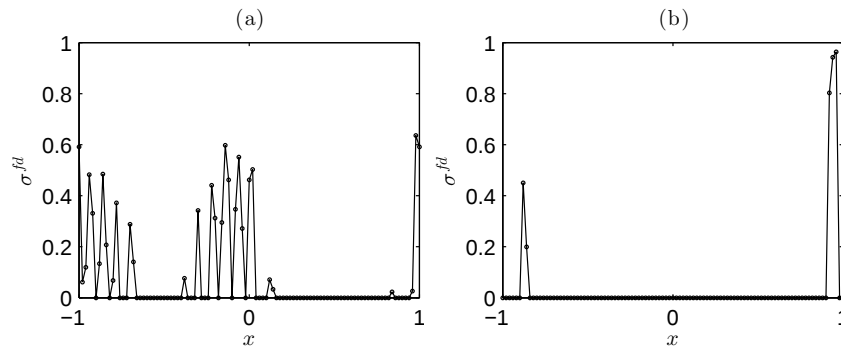


FIGURE 4.2 – Advection d’une interface gaz-gaz. Représentation à l’instant $t = 4$ de l’intensité du filtrage de capture des discontinuités σ^{fd} obtenue (a) sans et (b) avec indicateurs de monotonie ;
 • points du maillage.

Pour $\chi = 1/(\gamma - 1)$, ces différences sont de l’ordre de 10^{-15} . En revanche, pour $\chi = \gamma$, les différences $u - u_0$ et $p - p_0$ sont de l’ordre de 10^{-3} . Ceci est dû au fait que l’advection de la variable γ conduit à la formation d’oscillations de pression et de vitesse à l’interface qui se propagent dans tout le domaine. Ce phénomène a précédemment été observé par Karni [53]. Pour corriger cela, il a proposé de résoudre le système de trois équations non-conservatives pour la masse volumique, la vitesse et la pression

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} + \gamma p \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \end{cases}$$

La formation d’oscillations est rendue impossible ici uniquement grâce à la dernière équations. Cela peut être illustré en résolvant le présent cas test à l’aide du système d’équations quasi-conservatif suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) = 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} + \gamma p \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (4.3)$$

associé à l’équation d’advection (4.1) pour $\chi = \gamma$ et $\chi = 1/(\gamma - 1)$.

Les différences entre les solutions obtenues à l’aide du système quasi-conservatif (4.3) et les solutions analytiques pour la vitesse et la pression sont tracées sur les figures 4.4(a) et 4.4(b). Contrairement aux résultats précédents de la figure 4.3, les différentes erreurs $u - u_0$ et $p - p_0$ sont de l’ordre de 10^{-15} pour $\chi = \gamma$ tandis qu’elles sont de l’ordre de 1 pour $\chi = 1/(\gamma - 1)$. Les résultats obtenus avec l’équation d’advection sur $1/(\gamma - 1)$ sont donc

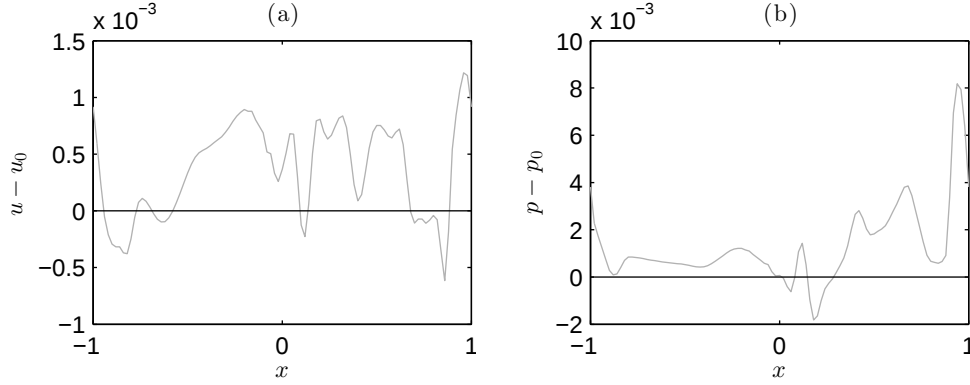


FIGURE 4.3 – Advection d’une interface gaz-gaz. Représentation des différences (a) $u - u_0$ et (b) $p - p_0$ à l’instant $t = 4$ obtenues à l’aide des équations d’Euler conservatives complétées par l’équation d’advection (4.1) pour — $\chi = \gamma$ et — $\chi = 1/(\gamma - 1)$.

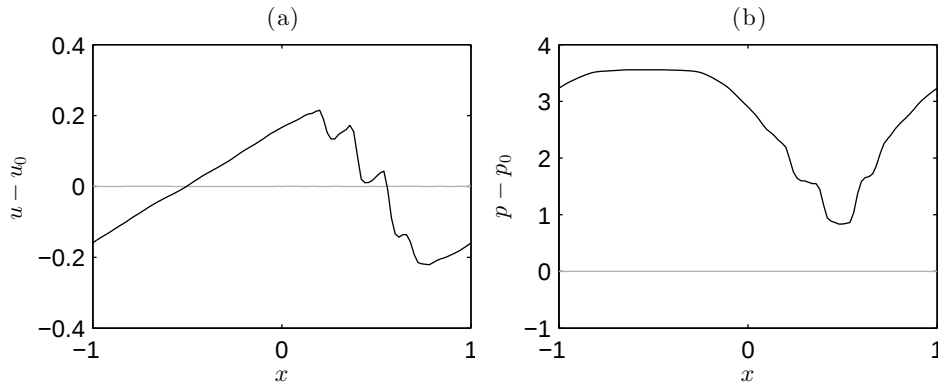


FIGURE 4.4 – Advection d’une interface gaz-gaz. Représentation des différences (a) $u - u_0$ et (b) $p - p_0$ à l’instant $t = 4$ obtenues à l’aide du système d’équations quasi-conservatif (4.3) complété par l’équation d’advection (4.1) pour — $\chi = \gamma$ et — $\chi = 1/(\gamma - 1)$.

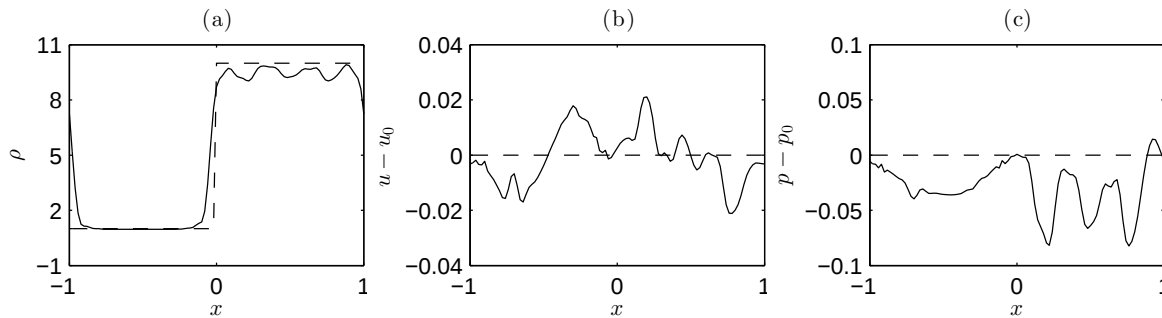


FIGURE 4.5 – Représentation (a) de la masse volumique et des différences (b) $u - u_0$ et (c) $p - p_0$ obtenues à $t = 4$ à l'aide de l'équation d'advection sous forme conservative (4.2) avec $\chi = 1/(\gamma - 1)$; --- solutions analytiques, • points du maillage.

très différents des solutions analytiques.

Il est donc possible de propager une interface déformable entre deux gaz à vitesse et pression uniformes, de deux façons différentes : soit en résolvant un système d'équations conservatif et en advectant $1/(\gamma - 1)$, soit en résolvant un système quasi-conservatif et en advectant γ . Cependant, l'un des objectifs de cette étude est de simuler des écoulements diphasiques compressibles et visqueux. Afin de propager correctement les ondes de pression il est nécessaire de résoudre les équations conservatives. L'advection de la quantité $1/(\gamma - 1)$ est donc choisie.

Pour terminer, le cas test est résolu à l'aide des équations d'Euler conservatives associées à l'équation d'advection écrite sous forme conservative (4.2) avec $\chi = 1/(\gamma - 1)$. Les résultats pour la masse volumique et les différences $u - u_0$ et $p - p_0$ sont comparés aux solutions analytiques sur la figure 4.5. D'importantes oscillations sont obtenues sur les profils de $u - u_0$ et $p - p_0$. Le profil de la masse volumique présente également de fortes oscillations à droite de l'interface entre $x = 0$ et $x = 1$. Ces résultats indiquent que l'équation d'advection de $1/(\gamma - 1)$ écrite sous forme conservative ne permet pas d'advecter correctement une interface entre deux fluides différents. L'équation d'advection de $1/(\gamma - 1)$ sous forme non-conservative sera donc résolue par la suite.

Influence des variables filtrées

Lors de la résolution des équations de Navier-Stokes, le filtrage des variables conservatives est préconisé [10]. Cependant, il est difficile de déterminer quelles quantités doivent être filtrées lorsque d'autres équations sont résolues, telle que l'équation d'advection de $1/(\gamma - 1)$. Le présent cas test est ici résolu pour différentes combinaisons de variables filtrées afin de choisir la combinaison permettant d'obtenir des solutions numériques les plus proches des solutions analytiques.

Les résultats calculés en appliquant les deux filtres (le filtre sélectif et le filtre des dis-

continuités) aux variables conservatives ρ , ρu et E ainsi qu'à γ sont représentés sur la figure 4.6. Les différences $u - u_0$ et $p - p_0$ sont de l'ordre de 10^{-2} . Ceci est à comparer à l'erreur de l'ordre de 10^{-15} obtenue sur la figure 4.1 en filtrant ρ , ρu , E et $1/(\gamma - 1)$. Le choix des variables filtrées a donc un effet non négligeable sur les solutions. Par conséquent, sans la suite de cette étude, le filtrage sélectif et le filtrage des discontinuités seront appliqués aux variables conservatives ainsi qu'à $1/(\gamma - 1)$.

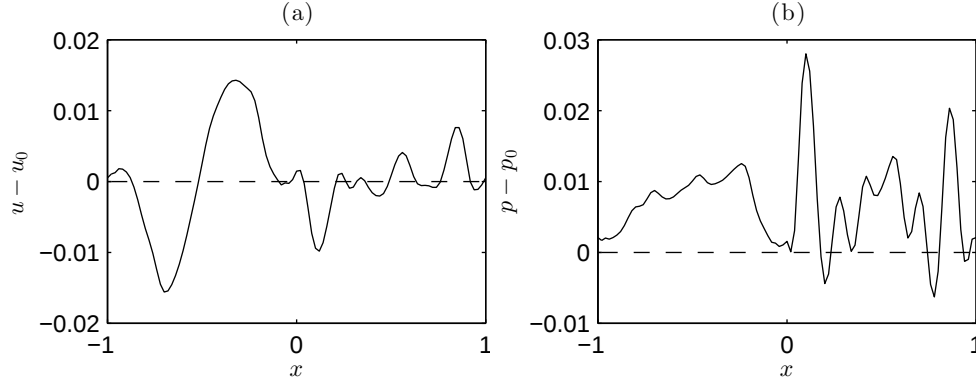


FIGURE 4.6 – Advection d'une interface gaz-gaz. Représentation à l'instant $t = 4$ des différences (a) $u - u_0$ et (b) $p - p_0$ obtenues lorsque les variables ρ , ρu , E et γ sont filtrées; . points du maillage, --- solutions analytiques.

Influence du filtrage des discontinuités

La procédure de capture des discontinuités a pour objet d'appliquer un filtre spatial uniquement lorsque des oscillations numériques d'amplitudes non négligeables apparaissent. Pour cela, il est nécessaire de choisir un filtre ainsi qu'un seuil de détection r_{th} adaptés. Le seuil doit permettre de détecter uniquement les oscillations significatives, et le filtre doit être suffisamment dissipatif pour supprimer ces oscillations tout en conservant les discontinuités les plus fines possible.

L'influence du filtre est tout d'abord caractérisée. Les solutions obtenues pour γ à l'instant final à l'aide d'un filtre standard d'ordre 2 et d'un filtre optimisé d'ordre 2 à faible erreur de dispersion [10] sont représentées sur la figure 4.7(a). Dans les deux cas, le seuil r_{th} vaut 2×10^{-5} . Avec le filtre optimisé, γ atteint des valeurs maximales très élevées au voisinage de l'interface. En revanche, avec le filtre standard cela n'est plus le cas. Ainsi, le filtre standard d'ordre 2 est suffisamment dissipatif pour interdire l'apparition de fortes oscillations de part et d'autre de l'interface. Il est donc mieux adapté à la capture d'interfaces que le filtre d'ordre 4.

Dans un second temps, le choix de la valeur du seuil r_{th} permettant d'estimer l'intensité du filtrage des discontinuités est justifié. Ce seuil indique la valeur minimale des détecteurs

de discontinuités r_ρ et r_p à partir de laquelle le filtre est appliqué avec une amplitude non nulle. Le cas test est alors résolu en considérant trois valeurs différentes pour r_{th} . Les profils de γ obtenus pour $r_{th} = 2 \times 10^{-6}$, 2×10^{-5} et 2×10^{-4} sont tracés sur la figure 4.7(b). Aucune oscillation n'apparaît en utilisant le seuil le plus faible. La solution calculée avec $r_{th} = 2 \times 10^{-5}$ présente de faibles oscillations de Gibbs. Enfin, les oscillations sont significatives lorsque la simulation est calculée à l'aide du seuil le plus élevé, pour $r_{th} = 2 \times 10^{-4}$. Cette valeur de seuil ne permet donc pas de détecter correctement les oscillations de part et d'autre de l'interface. La valeur de seuil alors préconisée pour la simulation d'écoulements diphasiques est 2×10^{-5} .

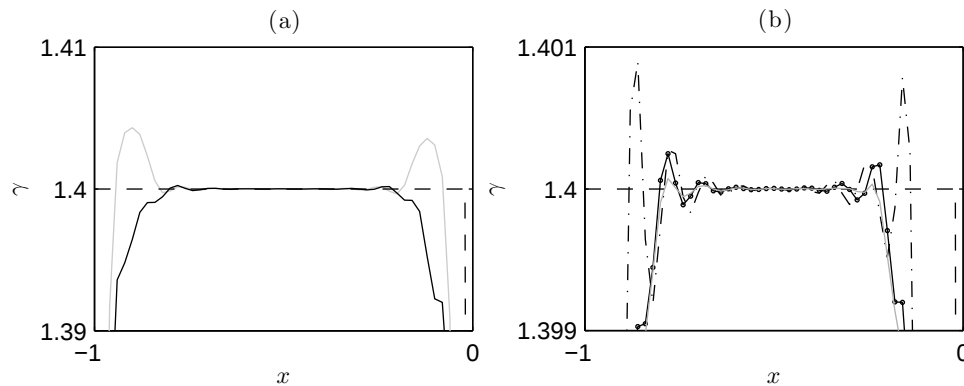


FIGURE 4.7 – Représentation de la quantité γ sur la moitié gauche du domaine à l'instant $t = 4$. (a) Solutions numériques obtenues à l'aide du filtre de capture des discontinuités — standard d'ordre 2 et — optimisé d'ordre 2. (b) Solutions numériques obtenues avec le filtre standard d'ordre 2 pour une valeur de seuil — $r_{th} = 2 \times 10^{-6}$, —•— $r_{th} = 2 \times 10^{-5}$ et -.-. $r_{th} = 2 \times 10^{-4}$; --- solution analytique.

4.1.2 Interface présentant un fort gradient de masse volumique

Afin de tester la robustesse de l'algorithme, l'advection d'une interface présentant un fort gradient de masse volumique est simulée. Précédemment le rapport des masses volumiques des deux fluides était égal à 10. Il est maintenant égal à 1000. Ce rapport a été choisi de façon à considérer un gradient de masse volumique caractéristique d'une interface entre l'air et l'eau. Les conditions initiales sont les suivantes :

$$(\rho, u, p, \gamma, B) = \begin{cases} (1, 0.5, 1/1.4, 1.4, 0), & \text{si } x < 0, \\ (1000, 0.5, 1/1.4, 1.2, 0), & \text{si } x \geq 0. \end{cases}$$

A $t = 0$, la vitesse et la pression sont uniformes au sein des deux fluides, et l'interface est située en $x = 0$. La masse volumique, le paramètre γ et les différences entre les solutions numériques et analytiques pour la vitesse et la pression, obtenus à $t = 4$, sont représentés sur

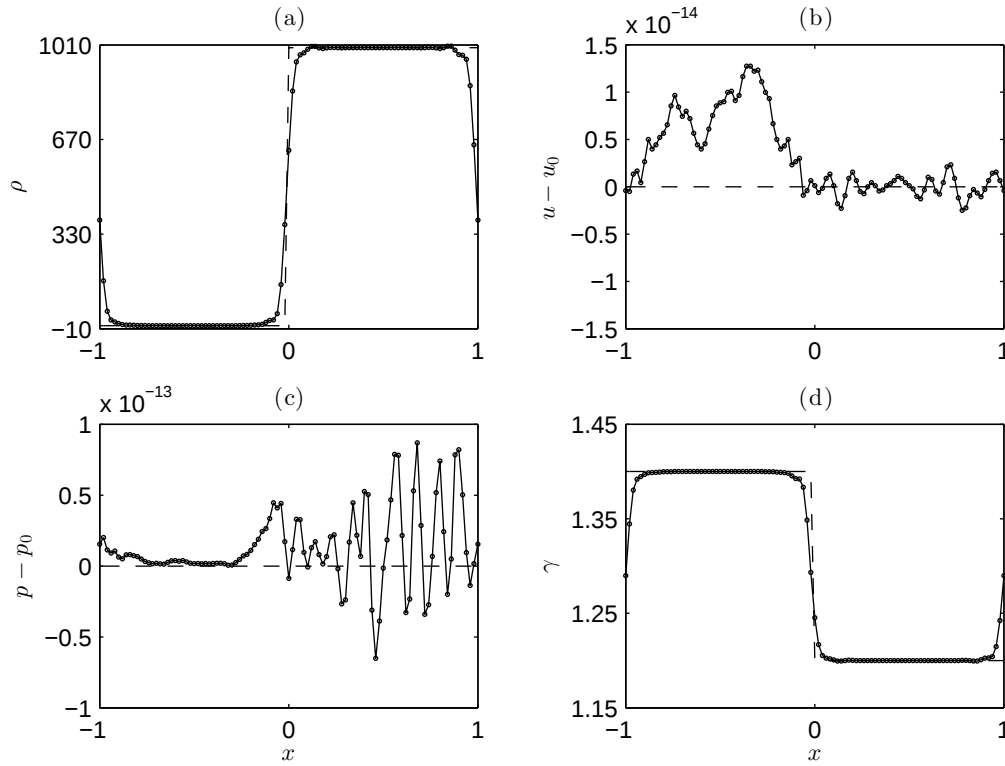


FIGURE 4.8 – Propagation d’une interface présentant un fort gradient de masse volumique. Représentation de (a) la masse volumique, (b) $u - u_0$, (c) $p - p_0$ et (d) γ à l’instant $t = 4$; --- solution analytique, . points du maillage.

la figure 4.8. Les différences $u - u_0$ et $p - p_0$ sont de l’ordre de 10^{-14} et 10^{-13} , respectivement. Les vitesse et pression restent donc uniformes. Les profils de la masse volumique et de γ sont par ailleurs en bon accord avec les solutions analytiques. Enfin, l’interface est correctement propagée et discrétisée par seulement cinq points du maillage. L’algorithme permet donc de simuler des écoulements contenant une interface entre deux fluides dont le rapport des masses volumiques est égal à 1000, comme par exemple, au sein d’un écoulement air-eau.

4.2 Tube à choc monophasique

Le test maintenant considéré est un tube à choc de Lax monophasique contenant de l’air [10]. Il doit permettre de vérifier que l’algorithme permet de capturer et propager trois singularités au sein d’un même écoulement : une onde de choc, une discontinuité de contact et une onde de raréfaction. Les conditions initiales sont les suivantes :

$$(\rho, u, p, \gamma, B) = \begin{cases} (0.445, 0.698, 3.528, 1.4, 0), & \text{si } x < 0 \\ (0.5, 0, 0.571, 1.4, 0), & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

La viscosité et la conductivité thermique de l'air sont nulles. L'onde de choc est initialement située en $x = 0$, et est visible sur la masse volumique, la vitesse et la pression. En revanche, le paramètre γ est constant puisque l'écoulement est monophasique. Le domaine de calcul s'étend de $x = -1$ à $x = 1$. Il est constitué de 200 mailles de dimension $\Delta x = 0.01$. La solution est calculée jusqu'au temps $t = 0.28$ en utilisant un pas de temps $\Delta t = 0.0016$. Pour le présent cas ainsi que pour l'ensemble des cas test suivants, des conditions aux limites de Dirichlet sont imposées. Ainsi, les conditions aux bords du domaine à l'instant initial restent inchangées durant tout le calcul. Ces conditions sont justifiées tant qu'aucune perturbation ne vient frapper les bords du domaine.

Les solutions analytiques ainsi que les solutions numériques obtenues à l'instant final $t = 0.28$ pour la masse volumique, la vitesse et la pression sont représentées sur les figures 4.9(a), 4.9(b) et 4.9(c), respectivement. Trois singularités sont observées sur le profil de la masse volumique : une onde de raréfaction, une discontinuité de contact et une onde de choc, indiquées par les lettres R, D et C, respectivement. Sur la vitesse comme sur la pression, la discontinuité de contact n'est pas visible puisque ces deux quantités sont continues au travers de cette singularité [64]. La discontinuité de contact est créée par l'onde de choc, et est ensuite advectée à la vitesse du fluide situé en amont du choc. La vitesse en amont d'un choc est inférieure à la vitesse de déplacement de ce choc. Par conséquent, la discontinuité de contact est advectée à une vitesse inférieure à celle du choc.

Au temps final, les solutions numériques sont en bon accord avec les solutions analytiques. Toutes les singularités sont correctement propagées et l'onde de choc est discrétisée par seulement quatre points du maillage. Enfin, aucune oscillation notable n'est observée.

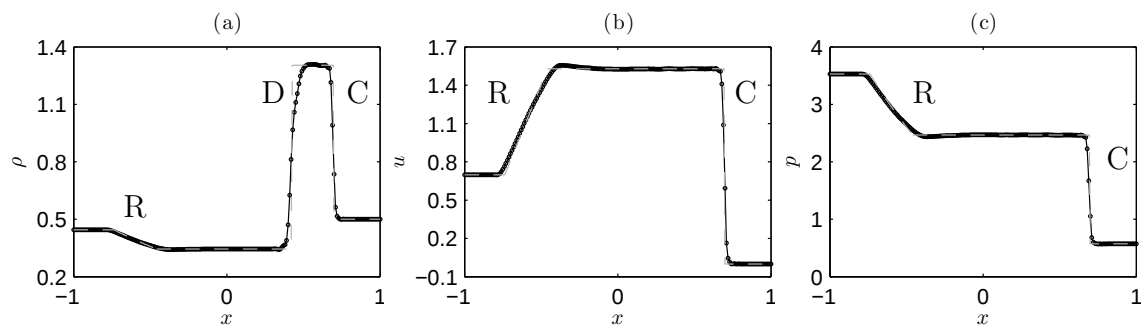


FIGURE 4.9 – Tube à choc monophasique de Lax. Représentation (a) de la masse volumique, (b) de la vitesse et (c) de la pression à l'instant $t = 0.28$; --- solution analytique, . points du maillage. Les lettres R, D et C indiquent l'onde de raréfaction, la discontinuité de contact et l'onde de choc.

4.3 Tube à choc gaz-gaz non-visqueux

Le cas test suivant concerne un tube à choc contenant deux gaz non visqueux de même masse volumique [2]. L'intérêt ici est de simuler une onde de choc et une interface au sein du même écoulement pour différentes tailles de mailles, afin de valider les méthodes numériques. Les conditions à $t = 0$ sont :

$$(\rho, u, p, \gamma, B) = \begin{cases} (1, 0, 500, 1.4, 0), & \text{si } x \leq 0.5, \\ (1, 0, 0.2, 1.6, 0), & \text{si } x > 0.5. \end{cases}$$

La masse volumique et la vitesse sont donc uniformes. Les discontinuités sur les profils de pression et de γ représentent l'onde de choc et l'interface, respectivement, initialement superposées en $x = 0.5$. Le domaine de calcul s'étend de $x = 0$ à $x = 1$ et est constitué de 800 mailles de dimension $\Delta x = 0.00125$. Les solutions sont calculées jusqu'au temps $t = 0.01$ à l'aide d'un pas de temps $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$. Le nombre CFL vaut alors $c\Delta t/\Delta x = 1.06$, où $c = \sqrt{\gamma p/\rho} = 26.5$ est la vitesse du son maximale dans l'écoulement à $t = 0$.

Les résultats numériques et analytiques obtenus à $t = 0.01$ pour la masse volumique, la vitesse, la pression et γ sont présentés sur la figure 4.10. Les solutions numériques sont en accord avec les solutions analytiques, et aucune oscillation notable n'apparaît autour des discontinuités. Toutes les singularités sont correctement propagées et l'onde de choc, indiquée par la lettre C, est constituée de seulement six mailles au lieu d'une seule maille initiale. Deux discontinuités se propageant dans la direction aval apparaissent sur le profil de la masse volumique sur la figure 4.10(a) : une interface à $x = 0.64$ et une onde de choc à $x = 0.7$. Une onde de raréfaction advectée dans la direction amont est aussi observée entre $x = 0.21$ et $x = 0.39$. Sur les profils de vitesse et de pression des figures 4.10(b) et 4.10(c), uniquement l'onde de raréfaction et l'onde de choc sont visibles. La vitesse maximale est située entre ces deux ondes, et atteint $u = 13.25$. Enfin, seule l'interface apparaît sur le profil de γ de la figure 4.10(d).

Les intensités du filtrage des discontinuités σ_p^{df} et σ_ρ^{df} obtenues à $t = 0.01$ sont présentées sur la figure 4.11. Elles sont nulles partout sauf autour de l'onde de choc. L'intensité σ_p^{df} estimée à partir de la pression est environ égale à 1 en douze points du maillage de $x = 0.67$ à $x = 0.69$, et l'intensité σ_ρ^{df} est non nulle de $x = 0.67$ à $x = 0.68$. Par conséquent, des oscillations persistent autour du choc sur la masse volumique et la pression. De plus, l'intensité du filtrage des discontinuités σ^{df} étant définie comme le maximum de σ_p^{df} et σ_ρ^{df} , l'intensité σ^{df} est identique à σ_p^{df} à cet instant.

La masse volumique obtenue à $t = 0.01$ à l'aide de cinq maillages composés de 800, 5×10^3 , 10^4 , 5×10^4 et 10^5 mailles est représentée sur la figure 4.12. Les cinq profils obtenus

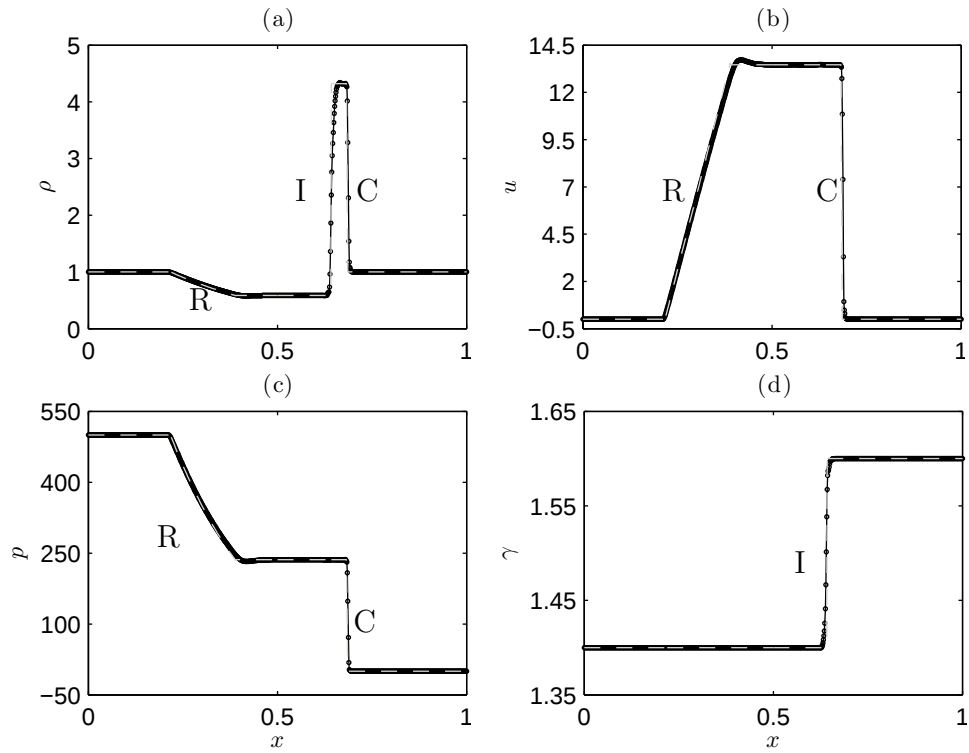


FIGURE 4.10 – Tube à choc gaz-gaz non-visqueux. Résultats pour (a) la masse volumique, (b) la vitesse, (c) la pression et (d) γ à l'instant $t = 0.01$; --- solution analytique, . points du maillage. Les lettres R, I et C indiquent l'onde de raréfaction, l'interface et l'onde de choc.

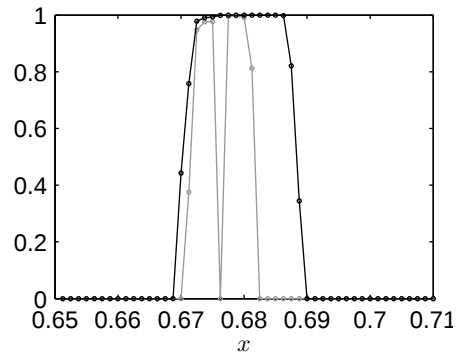


FIGURE 4.11 – Tube à choc gaz-gaz non-visqueux. Représentations à $t = 0.01$ des intensités du filtrage des discontinuités — σ_ρ^{fd} et — σ_p^{fd} ; . points du maillage.

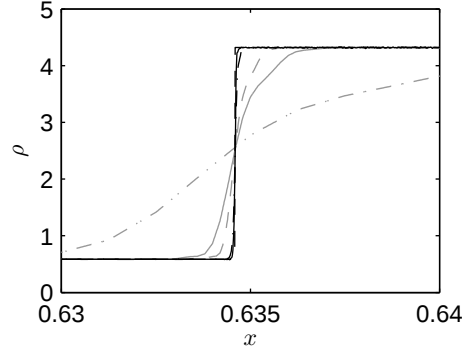


FIGURE 4.12 – Tube à choc gaz-gaz non-visqueux. Représentation de la masse volumique autour de l'interface pour $0.63 \leq x \leq 0.64$ à $t = 0.01$. Solutions obtenues à l'aide de 5 maillages contenant $\dots$ 800, — 5×10^3 , --- 10^4 , $\text{-}\cdot\text{-}\cdot\text{-}$ 5×10^4 et — 10^5 mailles; --- solution analytique.

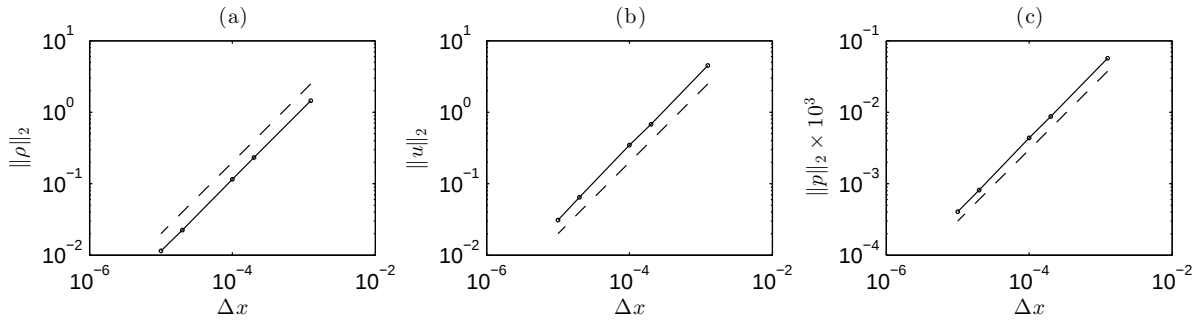


FIGURE 4.13 – Tube à choc gaz-gaz non-visqueux. Norme des erreurs calculées sur (a) la masse volumique, (b) la pression et (c) la vitesse à l'aide de 5 maillages contenant 800, 5×10^3 , 10^4 , 5×10^4 et 10^5 mailles; --- fonction proportionnelle à Δx

sont en accord avec la solution analytique, ce qui indique que l'interface est correctement propagée et ceci même sur le maillage le plus grossier. Comme prévu, l'interface est plus fine sur le maillage le mieux résolu. De plus, la dissipation de la partie aval de l'interface est nettement moins importante lorsque le maillage est raffiné. Afin de montrer la convergence des résultats, la norme des erreurs est calculée pour la masse volumique, la pression et la vitesse. Elle est montrée sur la figure 4.13 en fonction du pas de discrétisation spatial Δx . Elle est définie, au nœud i , par

$$\|L\|_2 = \sqrt{\frac{1}{n_x} \sum_i (L_{e,i} - L_{n,i})^2},$$

où L_e et L_n sont les solutions exactes et numériques, respectivement, et n_x est le nombre de points du maillage. L'erreur décroît lorsque le maillage est raffiné. De plus, comme indiqué par les pointillés noirs, l'erreur est proportionnelle à Δx . Ceci est cohérent avec l'ordre de l'erreur de dispersion du filtrage des discontinuités [10].

4.4 Tube à choc hélium-air

Le problème présenté dans cette section concerne un tube à choc contenant de l'hélium dans la moitié gauche du domaine et de l'air dans la moitié droite [1]. Il est résolu de deux façons différentes, soit à l'aide des équations d'Euler, soit à l'aide des équations de Navier-Stokes. Dans le second cas, les viscosités et les conductivités thermiques des deux fluides sont calculées à partir de relations empiriques données dans l'annexe A.2. Les conditions à $t = 0$ sont :

$$(\rho, u, p, \gamma, B) = \begin{cases} (14.54903 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 194.3 \times 10^5 \text{ Pa}, 1.67, 0), & \text{si } x \leq 0.5 \text{ m} \\ (1.16355 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 1 \times 10^5 \text{ Pa}, 1.4, 0), & \text{si } x > 0.5 \text{ m} \end{cases}$$

Initialement, la vitesse est donc nulle dans tout le domaine de calcul. L'onde de choc et l'interface hélium-air sont superposées au centre du domaine de calcul. Celui-ci est constitué de 800 mailles de $x = 0$ à $x = 1$ m. Les solutions sont calculées jusqu'à $t = 2 \times 10^{-4}$ s à l'aide d'un nombre CFL tel que $c_{he}\Delta t/\Delta x = 0.8$, où la vitesse de propagation du son dans l'hélium est égale à $c_{he} = \sqrt{\gamma p/\rho} = 1493.4 \text{ m.s}^{-1}$. Il s'agit de la vitesse de propagation du son maximale de l'écoulement à $t = 0$. Cette valeur correspond à une température de l'ordre de 600 K.

Les résultats obtenus à l'instant final pour la masse volumique, la vitesse, la pression et γ sont présentés sur la figure 4.14. Les solutions calculées à l'aide des équations d'Euler et des équations de Navier-Stokes sont comparées aux solutions analytiques pour un écoulement non visqueux. Un bon accord est observé entre les solutions numériques et analytiques. Toutes les singularités semblent être correctement propagées. Trois singularités apparaissent sur le profil de la masse volumique sur la figure 4.14(a) : une onde de raréfaction entre $x = 0.2$ m et $x = 0.58$ m, une interface à $x = 0.78$ m et un choc à $x = 0.85$ m. Les profils de la vitesse et de la pression sur les figures 4.14(b) et 4.14(c), contiennent seulement deux singularités, qui sont l'onde de raréfaction et l'onde de choc. Pour les deux écoulements, visqueux et non-visqueux, un pic apparaît sur la vitesse et la pression juste en amont de l'onde de raréfaction, ainsi que sur la masse volumique en aval de l'interface. Sur la figure 4.14(d), de faibles oscillations sont visibles sur le profil de γ en aval de l'interface. Les résultats calculés avec les équations d'Euler et de Navier-Stokes sont très similaires. Les effets visqueux sont donc négligeables dans ce cas.

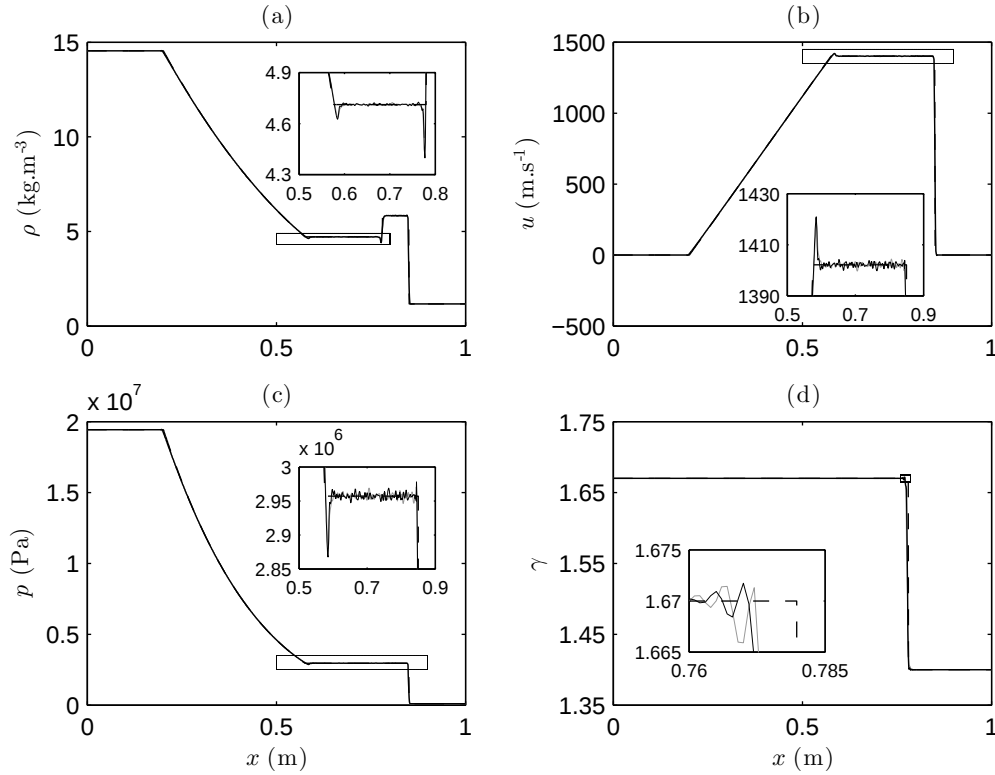


FIGURE 4.14 – Tube à choc hélium-air. Résultats pour (a) la masse volumique, (b) la vitesse, (c) la pression et (d) γ obtenus à $t = 2 \times 10^{-4}$ s à l’aide des équations — d’Euler et de — Navier-Stokes ; --- solutions analytiques.

4.5 Tubes à choc gaz-liquide

4.5.1 Tube à choc gaz-liquide présentant un fort gradient de pression

Le cas test suivant est un tube à choc diphasique entre un gaz et un liquide [87]. Il s’agit d’un écoulement dont l’interface gaz-liquide est initialement située à la même abscisse que l’onde de choc, en $x = 0.5$. De plus, le terme B de l’équation d’état raidie (2.36) présente également une discontinuité en $x = 0.5$. En effet, B vaut zéro au sein du gaz mais il est non nul dans le liquide. Ce problème a été choisi afin de tester la robustesse de l’algorithme en présence d’un fort gradient de pression de l’ordre de 20×10^3 et d’une forte variation du terme B . L’objectif est de se rapprocher des conditions rencontrées au sein d’écoulements diphasiques air-eau. Les conditions imposées à $t = 0$ sont :

$$(\rho, u, p, \gamma, B) = \begin{cases} (0.5, 100, 20 \times 10^3, 2, 0), & \text{si } x < 0.5, \\ (1, 0, 1, 4.4, 6000), & \text{si } x \geq 0.5. \end{cases}$$

Les solutions sont calculées au sein d'un domaine compris entre $x = 0$ et $x = 1$, discrétisé par 200 mailles uniformes de dimension $\Delta x = 0.005$. La simulation est effectuée jusqu'au temps $t = 0.001$ avec un pas de temps $\Delta t = 2.5 \times 10^{-5}$.

Le présent cas test est résolu afin de justifier tout d'abord le fait que la variable ξ définie par la relation (3.13), est moyennée sur 5 points (voir eq. (3.14)). Quatre solutions pour la pression obtenues sans moyenner ξ , et en calculant la moyenne de ξ sur 3, 5 et 7 points du maillage sont tracées sur la figure 4.15. Des oscillations sont visibles quel que soit le nombre de points utilisés dans la moyenne de ξ . Elles sont dues à la dispersion numérique introduite par les variations de l'intensité du filtre dynamique $\Delta\sigma^{fd}$. Ces oscillations sont de l'ordre de 5% lorsque la variable ξ n'est pas moyennée et lorsqu'elle est moyennée sur 3 points. Par ailleurs, les solutions estimées en moyennant ξ sur 5 et 7 points présentent des oscillations de l'ordre de 2%. Le choix de moyenner l'indicateur sur 5 points apparaît donc comme le meilleur compromis entre précision de la solution et temps de calcul nécessaire pour calculer cette moyenne à chaque itération.

Les solutions obtenues en moyennant la variable ξ sur 5 points du maillage pour la masse volumique, la vitesse, la pression, γ et B sont représentées sur la figure 4.16. Les cinq solutions numériques sont en bon accord avec les solutions de référence [87]. Toutes les singularités sont correctement formées et propagées. A l'instar du cas test précédent, une onde choc, une interface et une onde de raréfaction sont observées au sein de l'écoulement. Les profils de la masse volumique, de γ et de B montrent que l'interface, initialement localisée en $x = 0.5$, a été advectée dans la direction aval jusqu'en $x = 0.58$. L'onde de choc localisée en $x = 0.8$ est discrétisée par seulement quatre points du maillage malgré un très fort gradient de pression d'environ 20000.

4.5.2 Tube à choc gaz-liquide présentant une forte variation du paramètre γ

Ce test est un tube à choc entre un gaz et un liquide, pour lequel les discontinuités de pression et du terme B sont ici de plus faible amplitude que dans le cas précédent. Il s'agit ici de tester l'algorithme en présence d'un fort gradient sur γ comme ceci est le cas au sein d'écoulements diphasiques air-eau. Les conditions initiales sont [47] :

$$(\rho, u, p, \gamma, B) = \begin{cases} (1.241, 0, 2.753, 1.4, 0), & \text{si } x \leq 0, \\ (0.991, 0, 3.059 \times 10^{-4}, 5.5, 1.505), & \text{si } x > 0. \end{cases}$$

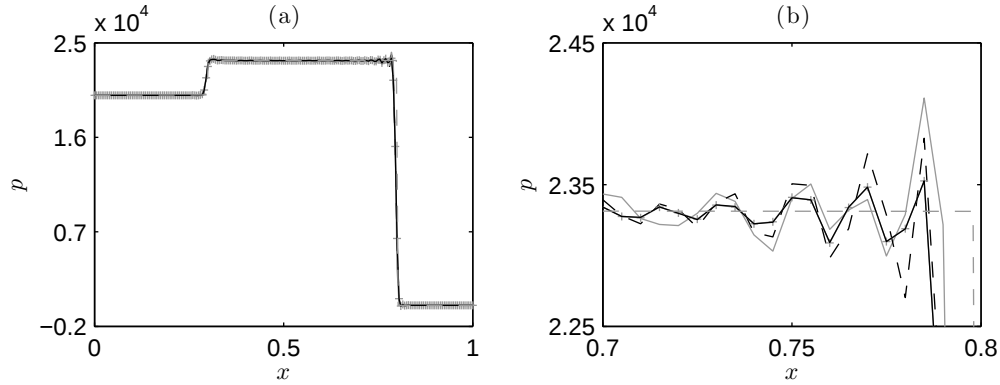


FIGURE 4.15 – Tube à choc diphasique gaz-liquide. Solutions pour la pression obtenues à $t = 0.001$ (a) dans tout le domaine de calcul et (b) entre les abscisses $x = 0.7$ et $x = 0.8$ pour une variable ξ --- non moyennée, et moyennée sur — 3, — 5 et + 7 points du maillage; --- solution de référence [87].

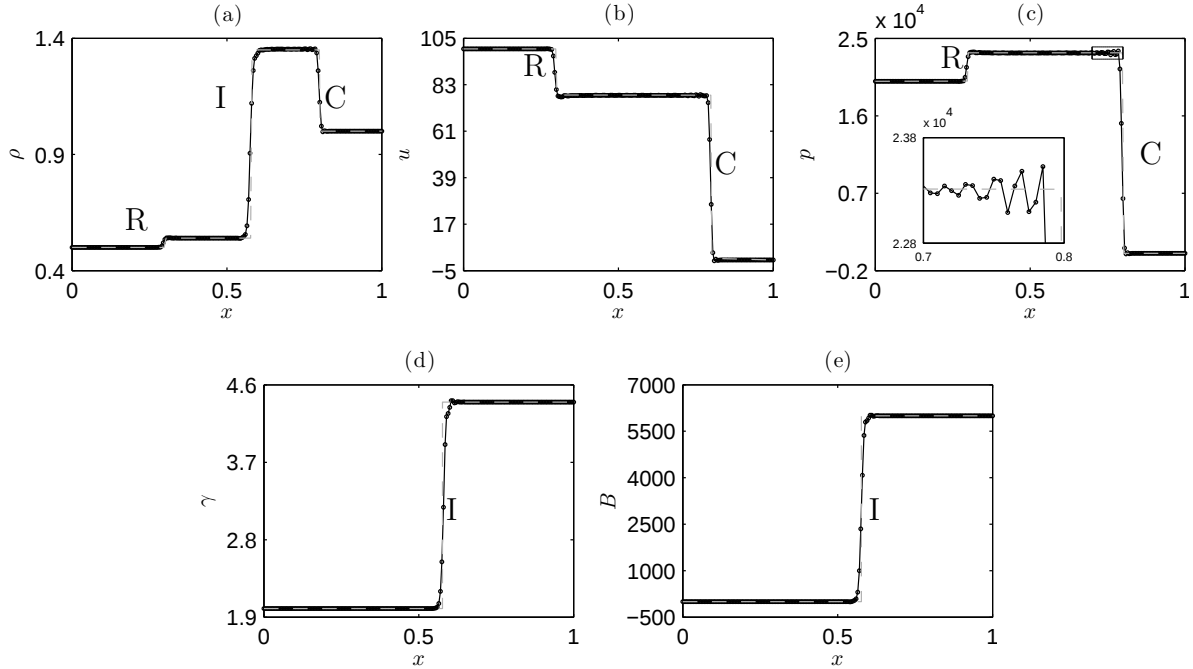


FIGURE 4.16 – Tube à choc diphasique gaz-liquide. Résultats pour (a) la masse volumique, (b) la vitesse, (c) la pression, (d) γ et (e) B à l'instant $t = 0.001$; --- solutions de référence [87], • points du maillage. Les lettres R, I et C indiquent l'onde de raréfaction, l'interface et l'onde de choc.

L'onde de choc et l'interface sont initialement au centre du domaine en $x = 0$. Le gaz est situé dans la moitié gauche du domaine, et le liquide dans la moitié droite. Le choc est créé en imposant une pression supérieure dans le gaz que dans le liquide.

Le domaine de calcul est compris entre $x = -5$ et $x = 5$ et est constitué de 100 mailles de dimension $\Delta x = 0.1$. La simulation est effectuée jusqu'au temps $t = 1$ avec un pas de temps $\Delta t = 0.023$. Le nombre CFL vaut alors $c\Delta t/\Delta x = 0.66$, où $c = 2.89$ est la vitesse du son maximale de l'écoulement à l'instant initial. Les résultats obtenus à l'instant final pour la masse volumique, la vitesse, la pression, γ et B sont présentés sur les figures 4.17(a), 4.17(b), 4.17(c), 4.17(d) et 4.17(e). L'ensemble des résultats est en assez bon accord avec les solutions de référence. Toutes les singularités sont correctement advectées, mais sont significativement dissipées. Ceci est dû au faible nombre de points discrétisant le domaine. Afin d'étudier l'effet de ce nombre de points, le maillage est raffiné en divisant la taille d'une maille par 10, soit $\Delta x = 0.01$. Les résultats ainsi obtenus sont présentés sur la figure 4.18. Les singularités sont nettement moins dissipées, et les discontinuités sont plus nettes. Diminuer la taille des mailles permet d'affiner les discontinuités, mais, en contrepartie, des oscillations de l'ordre de 2.4% apparaissent sur le profil de γ à droite de l'interface sur la figure 4.18(d).

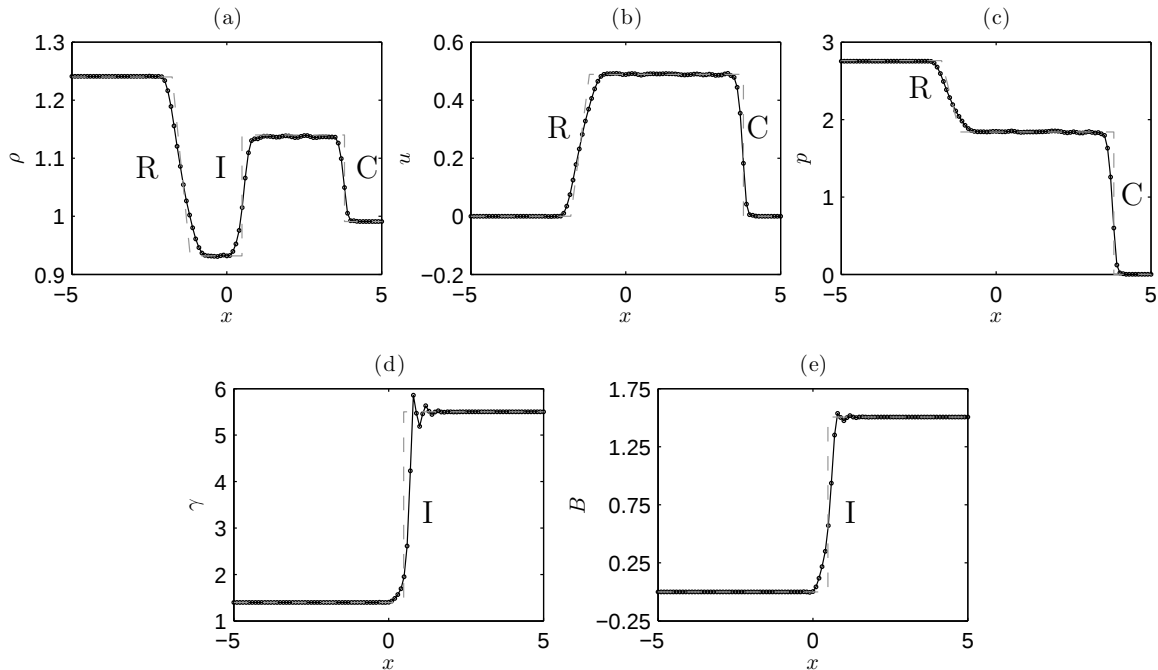


FIGURE 4.17 – Tube à choc gaz-liquide. Résultats pour (a) la masse volumique, (b) la vitesse, (c) la pression, (d) γ et (e) B à l'instant $t = 1$ avec $\Delta x = 0.1$; --- solutions de référence, • points du maillage. Les lettres R, I et C indiquent l'onde de raréfaction, l'interface et l'onde de choc.

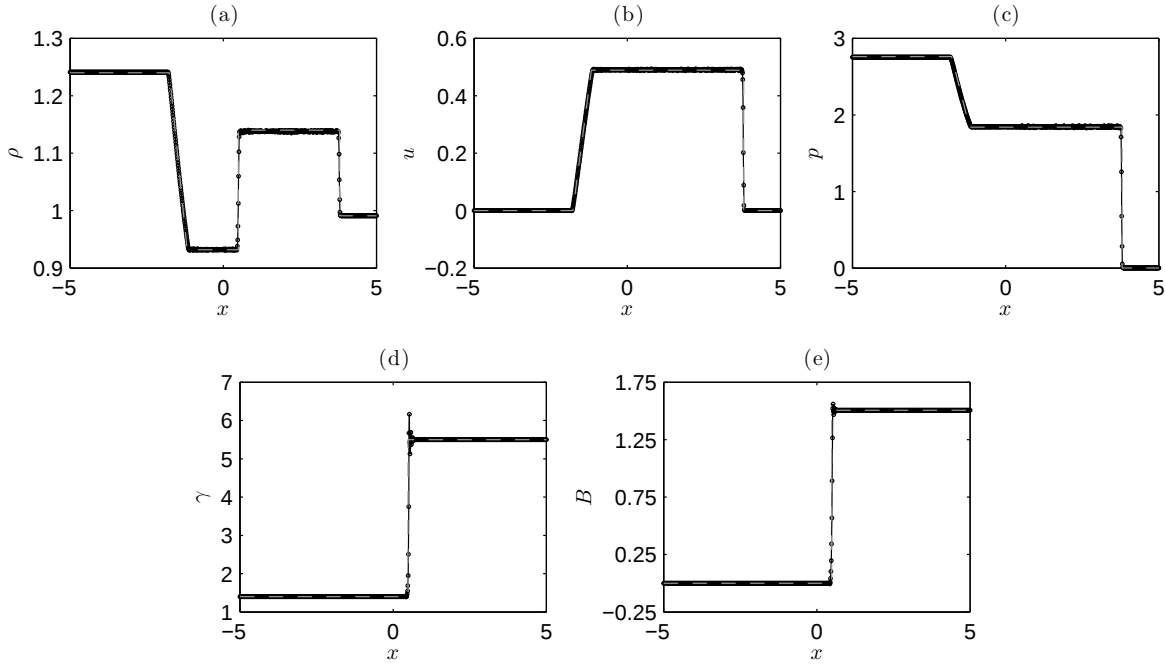


FIGURE 4.18 – Tube à choc gaz-liquide. Résultats pour (a) la masse volumique, (b) la vitesse, (c) la pression, (d) γ et (e) B à l'instant $t = 1$ avec $\Delta x = 0.01$; --- solutions analytiques, • points du maillage.

4.6 Onde de choc impactant une bulle d'hélium

Le présent cas test 1-D concerne une onde de choc se propageant dans l'air et impactant une bulle d'hélium [105]. Il permet de considérer l'interaction d'une onde de choc avec deux interfaces successives, générant de nombreuses ondes réfléchies et transmises. Les conditions initiales sont :

$$(\rho, u, p, \gamma, B) = \begin{cases} (1.3765, 0.3948, 1.57, 1.4, 0), & \text{pour } 0 < x \leq 0.25, \\ (1, 0, 1, 1.4, 0), & \text{pour } 0.25 < x \leq 0.4, \\ (0.138, 0, 1, 1.67, 0), & \text{pour } 0.4 < x \leq 0.6, \\ (1, 0, 1, 1.4, 0), & \text{pour } 0.6 < x \leq 1. \end{cases}$$

Les profils initiaux de masse volumique, vitesse, pression et γ sont représentés sur les figures 4.19(a), 4.19(b), 4.19(c) et 4.19(d). L'onde de choc incidente, indiquée par la lettre C, sur les profils de la masse volumique, de la vitesse et de la pression, est située en $x = 0.25$. La bulle d'hélium est représentée par deux interfaces, indiquées par la lettre I, localisées en $x = 0.4$ et $x = 0.6$ sur les profils de la masse volumique et de γ . Aucun liquide n'est présent dans cet écoulement, par conséquent le terme B est nul dans tout le domaine.

Le domaine de calcul est compris entre $x = 0$ et $x = 1$, et est constitué de 400 mailles de dimension $\Delta x = 0.0025$. La simulation est réalisée jusqu'au temps $t = 0.3$ avec un pas

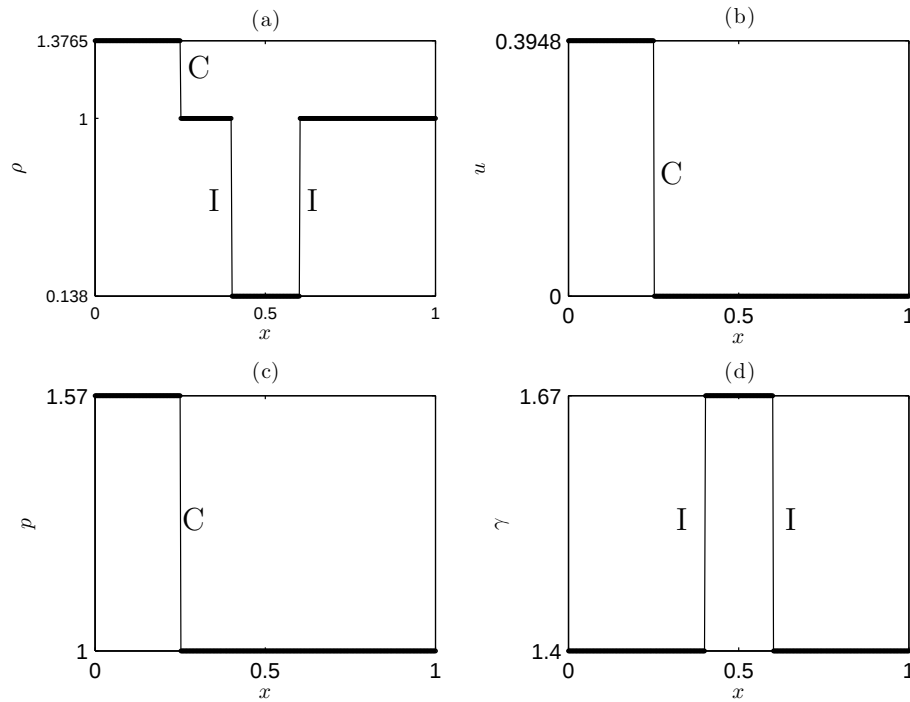


FIGURE 4.19 – Onde de choc impactant une bulle d’hélium. Conditions initiales pour (a) la masse volumique, (b) la vitesse, (c) la pression et (d) γ ; $\bullet$ points du maillage. Les lettres I et C indiquent les interfaces et l’onde de choc.

de temps $\Delta t = 0.001$. Les résultats obtenus à l’instant final pour la masse volumique, la vitesse, la pression et γ sont présentés sur la figure 4.20. Ils sont superposés aux solutions de référence obtenues par Tritschler *et al.* [105] à partir d’une simulation effectuée sur un maillage comprenant 6000 mailles. L’ensemble des résultats est donc en bon accord avec les solutions de référence. En particulier, toutes les singularités sont observées et correctement propagées.

Au cours des premiers instants, l’onde de choc impacte la première interface de la bulle en $x = 0.4$. L’onde de choc traverse alors cette interface et se propage dans l’hélium. De plus, une onde réfléchie est créée au contact de l’interface et se propage dans la direction amont. Cette onde réfléchie apparaît à l’instant final en $x \simeq 0.25$. Elle est indiquée par la lettre R sur les profils de la masse volumique, de la vitesse et de la pression, sur les figures 4.20(a), 4.20(b) et 4.20(c). L’onde de choc se propageant au sein de la bulle, impacte ensuite la seconde interface en $x = 0.6$. Elle traverse l’interface et est située au temps final à la position $x \simeq 0.75$, indiquée par la lettre C. Par ailleurs, une onde a été réfléchie au contact de l’interface, et se propage alors dans l’hélium de droite à gauche du domaine. A chaque contact entre l’onde se propageant dans la bulle et les interfaces, une onde est transmise dans l’air et une onde est réfléchie dans l’hélium. Cette répétition de transmissions et réflexions d’ondes persiste jusqu’à ce que l’onde se propageant dans la bulle est totalement

été transmise dans l'air. L'ensemble des ondes ayant été réfléchies et transmises apparaissent sur les profils de vitesse et de pression entre les abscisses $x \simeq 0.4$ et $x \simeq 0.7$. Par ailleurs, la solution obtenue pour le paramètre γ tracée sur la figure 4.20(d) indique que la bulle est située entre $x \simeq 0.5$ et $x \simeq 0.65$. Au temps final, la bulle a donc une épaisseur d'environ 0.15 au lieu des 0.2 initiaux. La bulle a donc été comprimée et advectée dans le sens de propagation de l'onde de choc initiale.

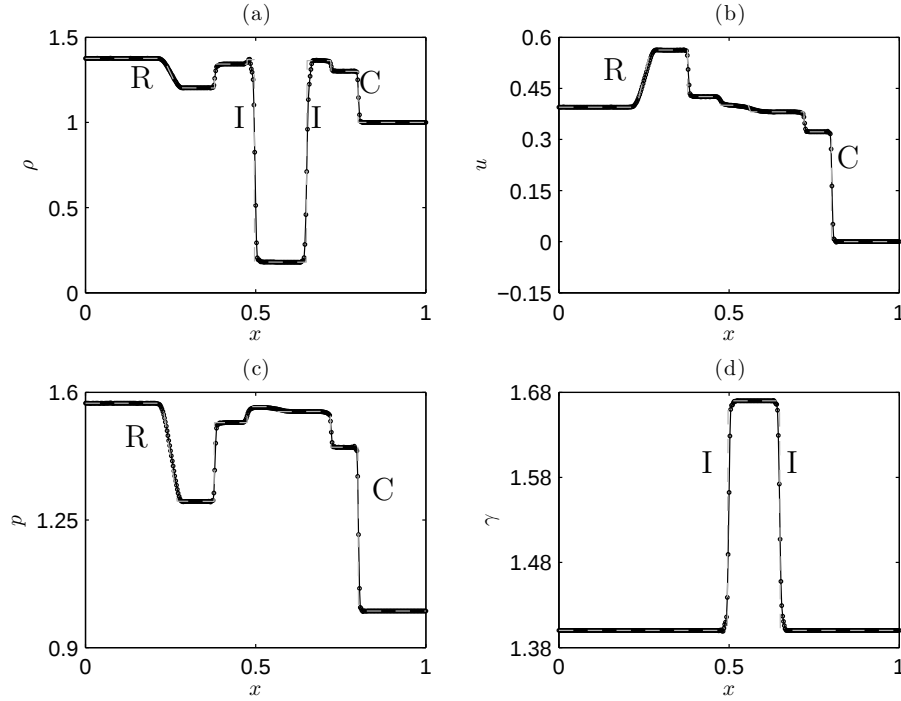


FIGURE 4.20 – Onde de choc impactant une bulle d'hélium. Résultats pour (a) la masse volumique, (b) la vitesse, (c) la pression et (d) γ à l'instant $t = 0.3$; --- solutions [105], • points du maillage. Les lettres R, I et C indiquent l'onde réfléchie, les deux interfaces et l'onde de choc incidente.

4.7 Validation du calcul de la température

Deux cas test monodimensionnels sont maintenant considérés afin de valider le calcul de la température à partir de l'équation (2.46) utilisée pour la simulation d'écoulements liquide-gaz.

4.7.1 Tube à choc monophasique

Le premier cas test est un tube à choc monophasique contenant de l'air. Dans un premier temps, il est résolu afin de choisir l'ordre du schéma utilisé pour le calcul de la dérivée temporelle de la pression $\partial p / \partial t$ présente dans les équations de la température sous forme

conservative (2.46) et non conservative (2.45). Dans un second temps, les solutions obtenues à l'aide de ces deux équations sont comparées.

Initialement, une onde de choc est située au centre du domaine de calcul. Les conditions initiales sont calculées à l'aide des relations de saut au travers d'un choc droit pour un nombre de Mach $M_a = 1.3$ [5], ce qui donne :

$$(\rho, u, p, T, \gamma) = \begin{cases} (1.8192 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 1.805 \times 10^5 \text{ Pa}, 345.8188 \text{ K}, 1.4) & \text{si } x/L \leq 0 \\ (1.2 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 10^5 \text{ Pa}, 290.36 \text{ K}, 1.4) & \text{si } x/L > 0 \end{cases}$$

Le domaine de longueur $L = 6 \text{ m}$ est centré en $x = 0$. Il est composé de 400 mailles de dimension $\Delta x/L = 0.0025$. L'écoulement est initialement au repos, et présente une discontinuité de pression, de masse volumique et de température en $x = 0$. La solution est calculée jusqu'à l'instant $t = 4.06 \text{ ms}$ pour un nombre $CFL = c_{air}\Delta t/\Delta x = 0.9$ estimé à partir de la vitesse de propagation du son dans l'air $c_{air} = \sqrt{\gamma p/\rho} \simeq 341.56 \text{ m.s}^{-1}$. Pour l'estimation, à chaque itération, de la dérivée temporelle de la pression $\partial p/\partial t$ dans l'équation de la température, quatre schémas décentrés allant de l'ordre 1 à l'ordre 4, notés *dpdtO1*, *dpdtO2*, *dpdtO3* et *dpdtO4* sont utilisés. Au temps n , la dérivée temporelle est alors égale à

$$\left. \frac{\partial p}{\partial t} \right|_n \simeq \sum_{j=0}^4 \frac{b_j p_{n-j\Delta t}}{\Delta t}, \quad (4.4)$$

où les coefficients b_j des schémas sont donnés dans le tableau 4.1.

	b_0	b_1	b_2	b_3	b_4
<i>dpdtO1</i>	1	-1	0	0	0
<i>dpdtO2</i>	3/2	-2	1/2	0	0
<i>dpdtO3</i>	11/6	-3	3/2	-1/3	0
<i>dpdtO4</i>	25/12	-4	3	-4/3	1/4

TABLEAU 4.1 – Coefficients des schémas décentrés d'ordre 1, 2, 3 et 4.

Les solutions obtenues à $t = 4.06 \text{ ms}$ en calculant la température à l'aide de l'équation sous forme conservative (2.46) sont présentées sur la figure 4.21. Pour les quatre schémas utilisés pour estimer $\partial p/\partial t$ dans l'équation de la température, trois singularités sont observées sur la figure 4.21(a) : un choc en $x/L = 0.263$, une discontinuité de contact en $x/L = 0.05$ et une onde de raréfaction entre les abscisses $x/L = -0.253$ et $x/L = -0.192$. Des oscillations de l'ordre de 3% par rapport à l'écart de température maximum sont observées en amont du choc sur la figure 4.21(b). Un pic de température de l'ordre de 9% est visible au niveau de la discontinuité de contact. Autour du choc, sur la figure 4.21(c), les profils de température obtenus en calculant la dérivée temporelle de la pression à l'aide

des schémas $dpdtO1$, $dpdtO2$ et $dpdtO3$ sont différents. De plus, la position de l'onde de choc n'est pas la même pour les trois schémas. En revanche, les résultats estimés avec les schémas $dpdtO3$ et $dpdtO4$ sont très similaires, et la position du choc est en bon accord avec la solution analytique. Par conséquent, afin de prédire correctement la propagation des discontinuités, le schéma décentré d'ordre 3 $dpdtO3$ est choisi.

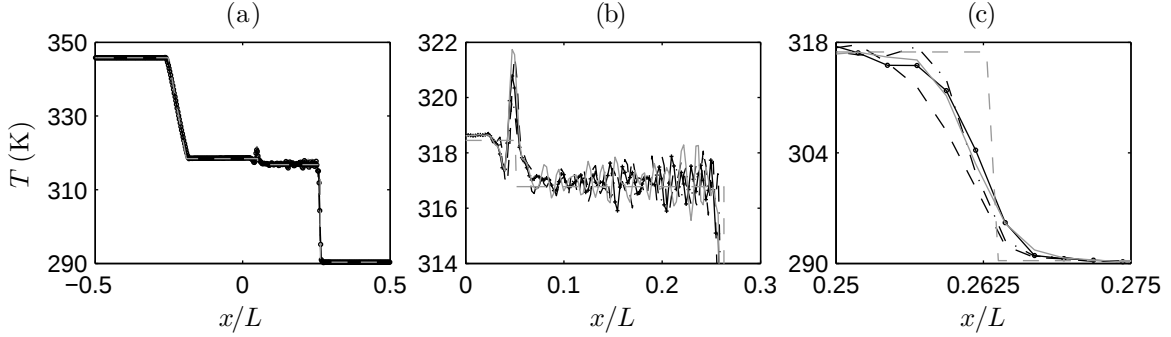


FIGURE 4.21 – Tube à choc monophasique. Représentations de la température à $t = 4.06$ ms (a) dans tout le domaine de calcul (b) en amont de l'onde de choc et (c) autour du choc, estimée à l'aide de l'équation sous forme conservative (2.46) en utilisant les schémas --- $dpdtO1$, -.-. $dpdtO2$, —●— $dpdtO3$ et — $dpdtO4$ pour le calcul de $\partial p/\partial t$; --- solution analytique.

L'influence de l'ordre du schéma pour le calcul du terme $\partial p/\partial t$ est également étudiée dans le cas où la température est déterminée à l'aide de l'équation sous forme non conservative (2.45). Les profils de température obtenus à $t = 4.06$ ms sont montrés sur la figure 4.22. Pour les quatre schémas, des oscillations de l'ordre de 1% sont observées en amont du choc et un pic de température de l'ordre de 4% est présent au niveau de la discontinuité de contact sur la figure 4.22(b). Enfin, comme avec l'équation de la température sous forme conservative, la position du choc sur la figure 4.22(c) est mieux prédite lorsque les schémas $dpdtO3$ et $dpdtO4$ sont utilisés.

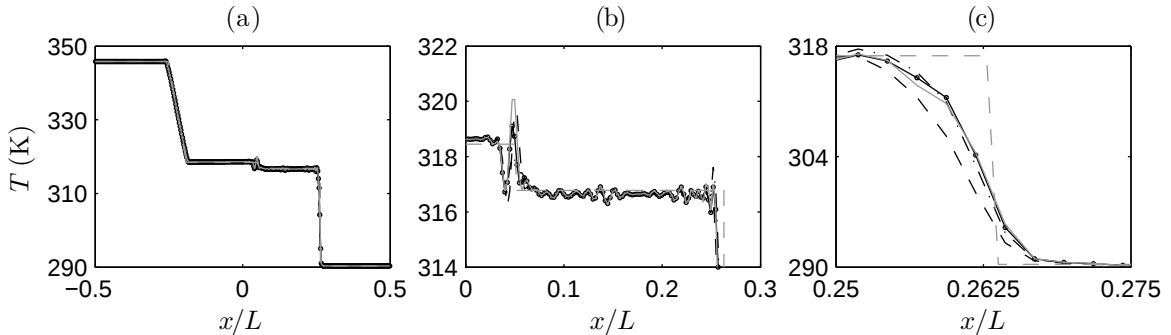


FIGURE 4.22 – Tube à choc monophasique. Représentation de la température à $t = 4.06$ ms (a) dans tout le domaine de calcul, (b) en amont de l'onde de choc et (c) au niveau du choc estimée à l'aide de l'équation sous forme non conservative (2.45) en utilisant les schémas --- $dpdtO1$, -.-. $dpdtO2$, —●— $dpdtO3$ et — $dpdtO4$ pour le calcul de $\partial p/\partial t$; --- solution analytique.

Enfin, les profils de température obtenus à $t = 4.06$ ms à l'aide des équations conservative

et non conservative en utilisant le schéma *dpdtO3* sont comparés sur la figure 4.23. Sur la figure 4.23(a), les deux résultats sont très similaires. Sur la figure 4.23(b), les oscillations observées en amont de l'onde de choc ainsi que le pic de température au niveau de la discontinuité de contact sont de plus faible amplitude lorsque l'équation non conservative est employée. Enfin, la position du choc observé sur la figure 4.23(c) est pratiquement identique dans les deux cas. Les deux formes de l'équation sur la température permettent donc d'obtenir des solutions comparables.

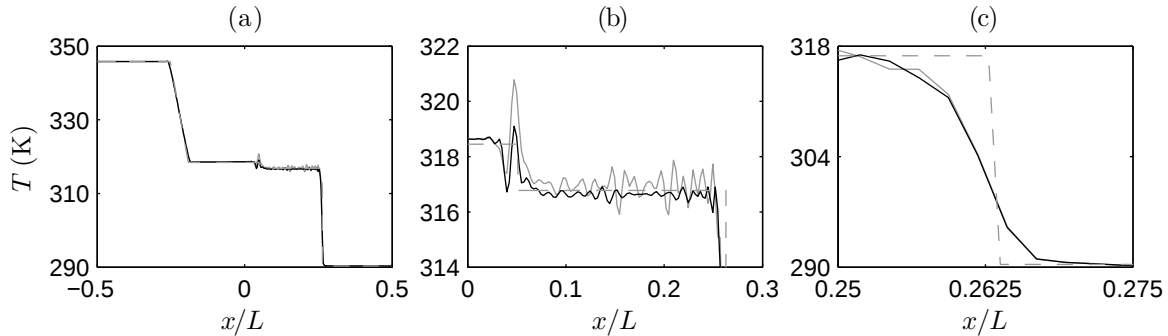


FIGURE 4.23 – Tube à choc monophasique. Représentation de la température à $t = 4.06$ ms (a) dans tout le domaine, (b) en amont de l'onde de choc et (c) autour du choc calculée à l'aide des équations sur la température sous forme — conservative et — non conservative.

4.7.2 Advection interface air-eau

Le second cas test porte sur l'advection d'une bulle d'air dans l'eau à vitesse, pression et température constantes [8]. L'intérêt de ce test est de vérifier que la température, la vitesse et la pression restent constantes dans tout le domaine sans produire d'oscillations numériques aux interfaces air-eau. Les conditions initiales sont [8] :

$$(\rho, \gamma, B) = \begin{cases} (1.177 \text{ kg.m}^{-3}, 1.4, 0) & \text{si } 0.25 \leq x/L \leq 0.75 \\ (998.426 \text{ kg.m}^{-3}, 6.12, 3430 \times 10^5 \text{ Pa}) & \text{sinon} \end{cases}$$

Le domaine de calcul est de dimension $L = 0.2$ mm , et est constitué de 200 mailles uniformes. Il s'étend de $x = 0$ à $x = L$ où des conditions aux limites périodiques sont imposées. La vitesse initiale est égale à $u = 173.6 \text{ m.s}^{-1}$, la pression vaut $p = 7.255 \times 10^4 \text{ Pa}$, et la température est égale à $T = 300 \text{ K}$. Deux discontinuités correspondant aux interfaces air-eau sont présentes sur les profils de la masse volumique de γ et de B . La solution est calculée jusqu'au temps $t = 1.152 \mu\text{s}$ à l'aide d'un pas de temps $\Delta t = 1.0446 \times 10^{-9} \text{ s}$. La bulle est ainsi propagée de la gauche vers la droite du domaine jusqu'à sa position initiale.

Le cas test est résolu à l'aide de trois méthodes différentes de calcul de la température.

Les deux premières consistent à résoudre les équations sur la température sous forme non conservative (2.45) et sous forme conservative (2.46). La troisième méthode est celle proposée par Beig et Johnsen [8] introduite à la section 2.3.2 dans laquelle le système d'équations (2.2) est complété des deux équations supplémentaires (2.44) et la température est obtenue à partir de l'équation d'état (2.43). Pour chacune de ces méthodes, les erreurs sur la pression, la vitesse et la température sont estimées à chaque itération à l'aide de l'expression suivante [8] :

$$\|U\|_{\infty} = \frac{\max(|U_{n,i} - U_{e,i}|)}{U_{e,i}} \quad (4.5)$$

où $U_{n,i}$ et $U_{e,i}$ sont les solutions numériques et exactes au nœud i . Les erreurs sur la vitesse, la pression et la température sont représentées sur les figures 4.24(a), 4.24(b) et 4.24(c). Quelque soit la méthode utilisée pour calculer la température, les quantités $\|u\|_{\infty}$ et $\|p\|_{\infty}$ sont de l'ordre de 10^{-10} et 10^{-13} durant toute la simulation. La vitesse et la pression restent donc uniformes au cours du temps dans tout le domaine de calcul. La norme de l'erreur sur la température est environ égale à 10^{-13} avec la méthode de Beig et Johnsen [8]. Elle est de l'ordre de 6×10^{-14} en utilisant la forme non conservative de l'équation de la température et de l'ordre de 2×10^{-14} avec la forme conservative. Par conséquent, les trois méthodes permettent de conserver l'uniformité de la température au cours du temps dans tout le domaine de calcul.

Par ailleurs, l'erreur sur la température est légèrement plus élevée en utilisant la forme non conservative (2.45) que la forme conservative de l'équation sur la température (2.46). Ceci peut également être observé sur la figure 4.25 montrant le rapport $(T - T_0)/T_0$ à l'instant final, où T_0 est la température exacte. En effet, ce rapport n'est pas centré autour de 0 lorsque la température est calculée avec l'équation non conservative. Par conséquent, l'équation sur la température écrite sous forme conservative (2.46) est choisie pour la simulation d'écoulements liquide-gaz.

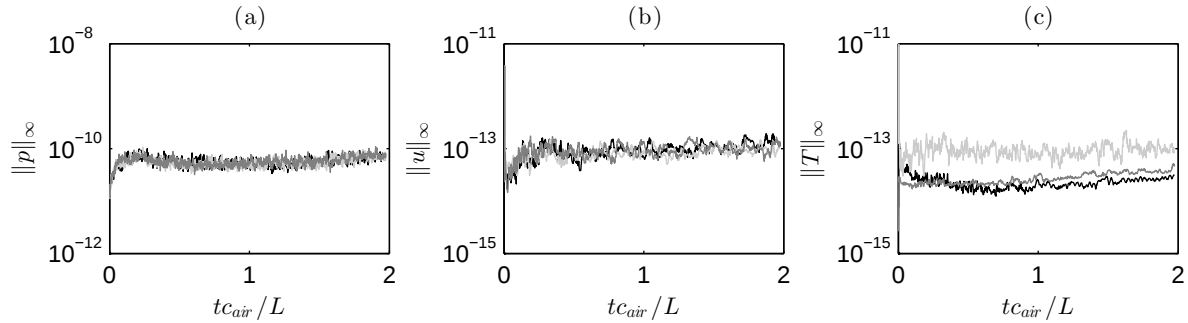


FIGURE 4.24 – Advection d’une interface air-eau. Norme des erreurs calculées à chaque itération sur (a) la pression, (b) la masse volumique et (c) la température obtenues en calculant la température à l’aide de — la méthode de Beig et Johnsen [8], — l’équation non conservative de la température (2.45) et — l’équation conservative de la température (2.46).

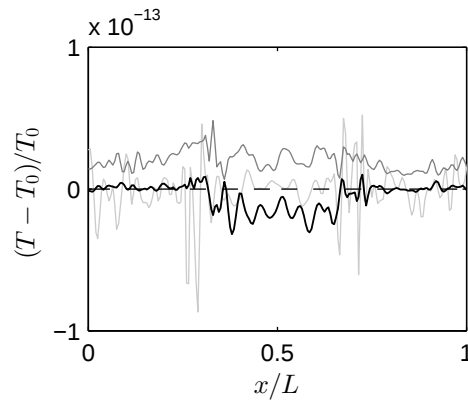


FIGURE 4.25 – Advection d’une interface air-eau. Erreur normalisée de la température à l’instant final obtenue à l’aide de — la méthode de Beig et Johnsen [8], — l’équation non conservative de la température et — l’équation conservative de la température; --- solution analytique.

5 Simulations 2-D d'écoulements gaz-gaz visqueux et conductifs

Les équations et méthodes numériques qui ont été validées dans le précédent chapitre sont maintenant utilisées afin de simuler deux écoulements bidimensionnels composés de deux gaz compressibles, visqueux et conductifs. Le premier écoulement détaillé dans la section 5.1 porte sur l'instabilité de Richtmyer-Meshkov développée à l'interface entre l'air et l'hexafluorure de soufre (SF₆). Le second écoulement, présenté dans la section 5.2, est composé d'une bulle cylindrique remplie d'hélium ou de chlorodifluorométhane (R22), impactée par une onde de choc se propageant dans l'air. Ces écoulements sont très souvent utilisés pour la validation de méthodes numériques [24, 28, 39, 60, 105] car ils ont été étudiés expérimentalement notamment par Jacobs et Krivets [42] et par Haas et Sturtevant [33]. Ainsi, les résultats numériques peuvent être comparés aux données expérimentales.

5.1 Instabilité de Richtmyer-Meshkov

Le premier problème étudié concerne l'instabilité de Richtmyer-Meshkov (IRM) créée à l'interface entre deux gaz de masses volumiques différentes. Cette instabilité se développe suite au passage d'une onde de choc à travers l'interface qui est initialement perturbée [14]. L'IRM est un cas particulier de l'instabilité de Rayleigh-Taylor [83] formée à l'interface entre un fluide léger placé en-dessous d'un fluide lourd, tous deux soumis à l'accélération de la gravité.

Dans cette section, l'étude expérimentale de Jacobs et Krivets [42] est considérée. Elle porte sur le développement de l'IRM à l'interface entre l'air et l'hexafluorure de soufre (SF₆). Dans un premier temps, les conditions imposées à l'instant initial sont détaillées. Dans un second temps, les résultats obtenus à l'aide de différents maillages sont présentés et comparés aux données expérimentales. Enfin, l'influence de la méthode de capture des

discontinuités sur la forme de l'instabilité est montrée.

5.1.1 Conditions initiales

Les conditions imposées à l'instant initial ont été choisies afin de se rapprocher de l'étude expérimentale menée par Jacobs et Krivets [42]. Leurs expériences ont été réalisées à l'aide d'un tube à choc vertical de section carrée, dans lequel l'air et le SF6 à pression et température ambiantes sont introduits aux extrémités supérieure et inférieure, respectivement. Le tube à choc est ensuite agité horizontalement afin de perturber l'interface de façon sinusoïdale sans utiliser une membrane solide. Ensuite, un diaphragme permettant de séparer l'air sous pression de l'air à pression ambiante est perforé afin de créer une onde de choc plane qui se propage dans l'air et impacte l'interface perturbée. La configuration utilisée pour les simulations numériques est schématisée sur la figure 5.1.

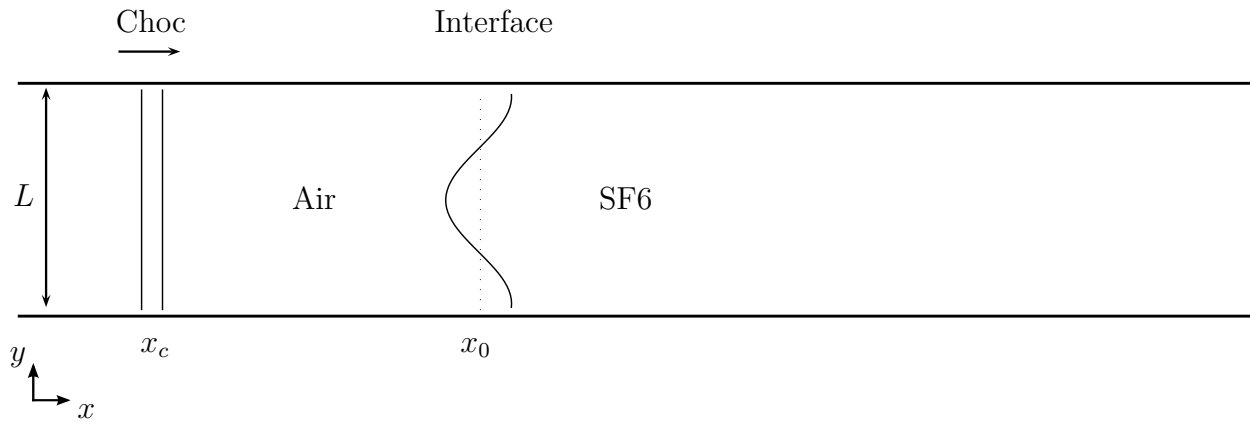


FIGURE 5.1 – Configuration initiale pour la simulation de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov développée à l'interface air-SF6 [42].

L'onde de choc représentée par un double trait vertical à l'abscisse x_c se propage dans l'air avec un nombre de Mach $M_a = 1.29$. L'interface est initialement localisée en x_0 et la distance entre x_c et x_0 est arbitrairement égale à 2 cm à $t = 0$. L'interface est perturbée à l'aide d'un profil en cosinus. Ainsi, sa position initiale x_{int} est exprimée de la façon suivante [39, 105] :

$$x_{int} = x_0 + a_0 \times \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_{int}}y\right),$$

où $a_0 = 2.9$ mm est l'amplitude de la perturbation et $\lambda_{int} = 59$ mm est la longueur d'onde. Expérimentalement, la distance entre les parois du tube à choc est plus grande que la longueur d'onde de la perturbation. Par conséquent, plusieurs instabilités se développent sur l'interface. Numériquement, les bords supérieur et inférieur du domaine de calcul représentés

par les deux lignes horizontales sont espacés d'une distance $L = \lambda_{int}$, et des conditions périodiques sont imposées sur ces deux frontières. De cette façon, une seule instabilité est formée. Des conditions de rayonnement développées par Tam et Dong [102] sont imposées aux extrémités amont et aval du domaine de calcul. Les ondes de pression peuvent alors se propager hors du domaine en générant des réflexions d'amplitude de l'ordre de 2% de celle des ondes sortantes.

Les conditions initiales pour la masse volumique, la vitesse axiale, la pression et le paramètre γ sont :

$$(\rho, u_x, p, \gamma) = \begin{cases} (2.2997 \text{ kg.m}^{-3}, 136 \text{ m.s}^{-1}, 179750 \text{ Pa}, 1.27) & \text{pour } x \leq x_c \\ (1.4933 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 101325 \text{ Pa}, 1.27) & \text{pour } x_c < x \leq x_{int} \\ (6.0156 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 101325 \text{ Pa}, 1.0984) & \text{pour } x > x_{int} \end{cases}$$

La masse volumique de l'air de 1.4933 kg.m^{-3} est supérieure à la masse volumique obtenue à l'aide de la relation des gaz parfaits de 1.194 kg.m^{-3} pour une température $T = 296 \text{ K}$ et une pression $p = 101325 \text{ Pa}$. En effet, dans les expériences l'air est composé à 25% d'acétone gazeux afin de visualiser l'écoulement lorsqu'il est éclairé par une nappe laser. Par conséquent, la masse molaire du mélange air-acétone $\mathcal{M}_{aa}$ est calculée en utilisant l'expression suivante :

$$\mathcal{M}_{aa} = 0.25\mathcal{M}_{acetone} + 0.75\mathcal{M}_{air} = 36.27 \text{ g.mol}^{-1},$$

où $\mathcal{M}_{air} = 29 \text{ g.mol}^{-1}$ est la masse molaire de l'air et $\mathcal{M}_{acetone} = 58.08 \text{ g.mol}^{-1}$ est la masse molaire de l'acétone. Le rapport des capacités calorifiques du mélange air-acétone $\gamma_{aa} = 1.27$ ainsi que la température ambiante de l'expérience nous ont été communiqués par Krivets [43]. Les masses volumiques du mélange air-acétone ρ_{aa} et du SF6 ρ_{SF6} en aval de l'onde de choc sont obtenues à l'aide de la relation des gaz parfaits :

$$\rho_{aa} = \frac{p}{T} \frac{\mathcal{M}_{aa}}{R_u} = 1.4933 \text{ kg.m}^{-3} \quad \text{et} \quad \rho_{SF6} = \frac{p}{T} \frac{\mathcal{M}_{SF6}}{R_u} = 6.0156 \text{ kg.m}^{-3},$$

où $\mathcal{M}_{SF6} = 146.06 \text{ g.mol}^{-1}$ est la masse molaire du SF6 et $R_u = 3.14462 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits. Le nombre d'Atwood est alors donné par l'expression

$$A = \frac{(\rho_{SF6} - \rho_{air})}{(\rho_{SF6} + \rho_{air})} = 0.6023.$$

Expérimentalement, il est environ égal à 0.6 [42]. Enfin, les conditions initiales en amont de l'onde de choc sont calculées à partir des relations de saut pour un choc plan [5].

Les études expérimentales de Jacobs et Krivets [42] et de Collins et Jacobs [19] indiquent que l'épaisseur initiale de l'interface entre l'air et le SF6 est d'environ 5 mm. Cette épaisseur est due à la diffusion entre les deux gaz en contact. Dans la simulation, l'épaisseur de l'interface δ_{99}^{int} initiale est modélisée à l'aide d'un profil en tangente hyperbolique centré sur la position de l'interface x_{int} [105]. Cette épaisseur est arbitrairement définie comme la distance entre les positions où la fraction volumique est égale à 0.01 et 0.99. Ainsi, les fractions volumiques du mélange air-acétone ϕ_{aa} et du SF6 ϕ_{SF6} sont initialement déterminées par

$$\begin{cases} \phi_{aa} = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{x - x_{int}}{\delta_{int}} \right) \right], \\ \phi_{SF6} = 1 - \phi_{aa}, \end{cases} \quad (5.1)$$

où δ_{int} est égale à

$$\delta_{int} = \frac{\delta_{99}^{int}}{\left(-2 \times \tanh^{-1} \left(\frac{0.01-0.5}{0.5} \right) \right)}.$$

Les viscosité dynamiques, les viscosités de volume ainsi que les conductivités thermiques de l'air et du SF6 sont déterminées à chaque itération à l'aide de relations empiriques détaillées dans l'annexe A.2.

5.1.2 Paramètres numériques

Cinq maillages uniformes contenant 64, 128, 256, 512 et 1024 mailles dans la direction y , notés $ny64$, $ny128$, $ny256$, $ny512$ et $ny1024$, respectivement, sont utilisés. Pour l'avancement temporel, le pas de temps Δt est défini par le nombre CFL tel que $CFL = c\Delta t/\Delta x$ où c est la vitesse du son maximale rencontrée dans l'écoulement à l'instant initial. Dans le mélange air-acétone, elle est égale à $c_{aa} = 293.5 \text{ m.s}^{-1}$ tandis que la vitesse du son dans le SF6 est égale à 136.02 m.s^{-1} . Le pas de temps est donc déterminé en utilisant le nombre CFL estimé à partir de la vitesse du son dans le mélange air-acétone. Les nombres de mailles n_x dans la direction x et n_y dans la direction y ainsi que les nombres CFL et les pas de temps associés aux cinq maillages sont donnés dans le tableau 5.1.

Afin de considérer exactement les mêmes conditions initiales pour tous les maillages, l'épaisseur du choc est fixée en imposant le profil en tangente hyperbolique (5.1) sur la masse volumique, la vitesse axiale et la pression. L'épaisseur du choc est arbitrairement fixée égale à $\delta_{99}^{ch} = 3.7 \text{ mm}$ afin de discrétiser l'onde de choc par 4 mailles sur le maillage le plus grossier $ny64$. Par conséquent, son épaisseur initiale est égale à $8\Delta x$, $16\Delta x$, $32\Delta x$ et $64\Delta x$ sur les maillages $ny128$, $ny256$, $ny512$ et $ny1024$.

Les résultats présentés dans la section 5.1.3 sont calculés sans utiliser la procédure de capture des discontinuités pour deux raisons. Premièrement, cette procédure n'est pas néces-

saire car le choc est relativement faible et l'interface est très bien discrétisée. Deuxièmement, lorsque la procédure de capture des discontinuités est employée, de petites instabilités sont créées sur l'interface air-SF6. Ceci sera montré dans la section 5.1.4.

	n_x	n_y	nombre de mailles	CFL	Δt (μs)
<i>ny64</i>	1023	64	65×10^3	0.1	0.314
<i>ny128</i>	2046	128	262×10^3	0.1	0.158
<i>ny256</i>	4092	256	1×10^6	0.3	0.235
<i>ny512</i>	8186	512	4.2×10^6	0.5	0.196
<i>ny1024</i>	16372	1024	16.8×10^6	0.9	0.177

TABLEAU 5.1 – Nombres de mailles n_x dans la direction x et n_y dans la direction y , nombres CFL et pas de temps Δt associés aux simulations effectuées à l'aide des maillages *ny64*, *ny128*, *ny256*, *ny512* et *ny1024*.

5.1.3 Comparaison avec l'expérience

Les champs de masse volumique obtenus aux temps $t = 1.76, 3.06, 4.96$ et 5.86 ms à l'aide des maillages *ny128*, *ny256* et *ny512* sont comparés aux visualisations expérimentales [42] sur la figure 5.2. L'instant $t = 0$ correspond au moment où a lieu le premier contact entre l'onde de choc et l'interface. La masse volumique du SF6 est en noir et celle du mélange air-acétone est en gris. Afin de pouvoir comparer aux visualisations expérimentales, les solutions numériques ont été pivotées de 90° dans le sens horaire.

Au temps $t = 1.76$ ms sur la figure 5.2(a), l'IRM commence à se développer. Le mélange air-acétone est accéléré plus rapidement que le SF6, ce qui entraîne la formation d'une pointe de SF6 pénétrant le mélange air-acétone. Deux spirales de SF6 sont observées de part et d'autre de cette pointe sur les simulations effectuées avec les maillages *ny256* et *ny512*. Au second instant, sur la figure 5.2(b), l'instabilité croît et prend la forme d'un champignon. Deux spirales sont observées expérimentalement de part et d'autre du champignon. Dans les simulations, ces spirales sont perturbées générant alors de petites structures qui sont mieux résolues sur le maillage le plus fin. Aux instants suivants, sur les figures 5.2(c-d), les deux fluides sont mélangés à droite et à gauche du pied du champignon et de petites perturbations apparaissent en haut du pied. La simulation effectuée sur le maillage le plus fin permet de mieux distinguer les petites structures et d'obtenir une instabilité ayant une forme très similaire à celle obtenue expérimentalement.

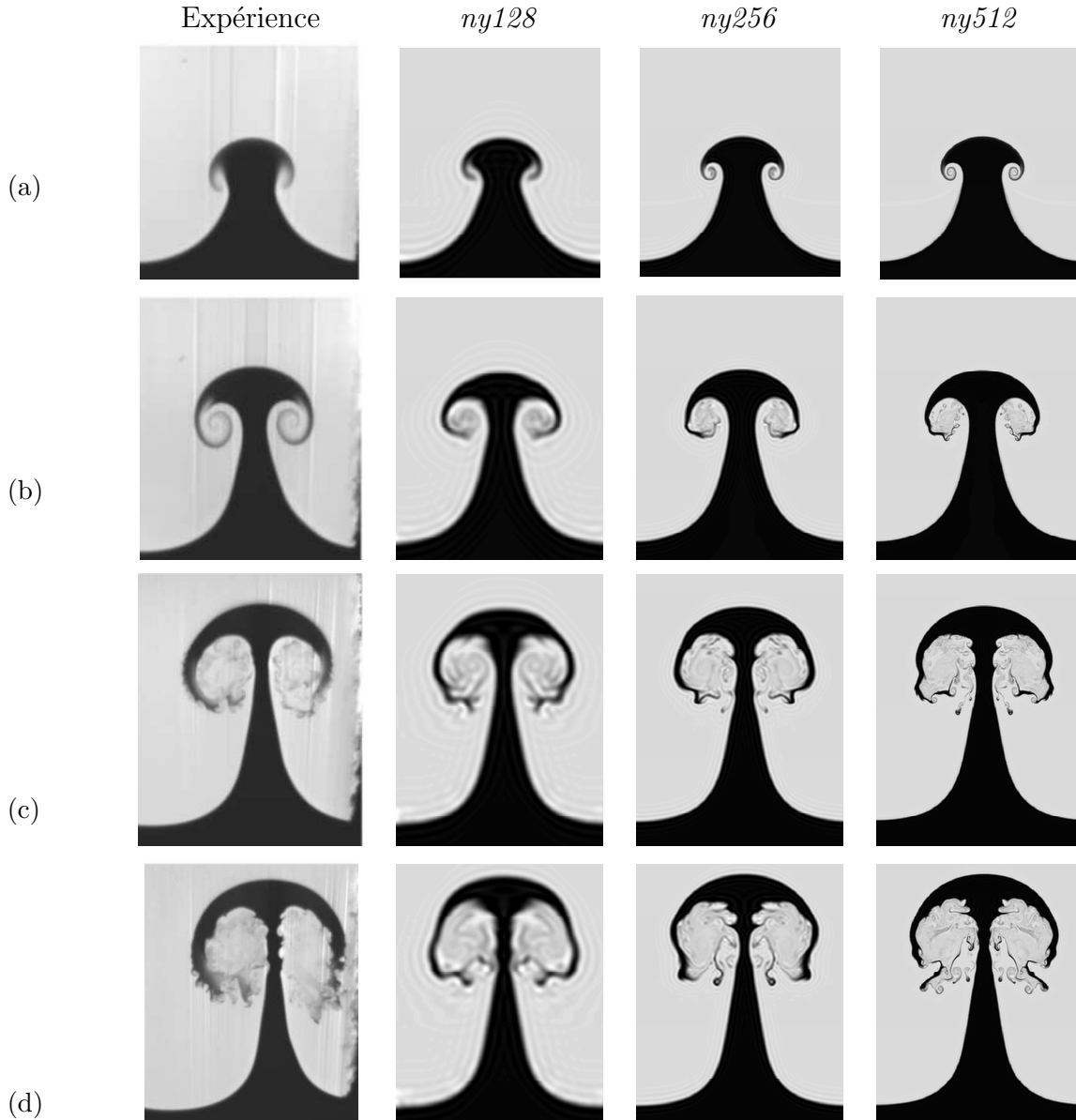


FIGURE 5.2 – Visualisations expérimentales de Jacobs et Krivets [42] (première colonne) à (a) $t = 1.76$ ms, (b) $t = 3.06$ ms, (c) $t = 4.96$ ms et (d) $t = 5.86$ ms ; champs de masse volumique obtenus à l'aide des maillages *ny128* (seconde colonne), *ny256* (troisième colonne) et *ny512* (quatrième colonne). La masse volumique du mélange air-acétone est en gris et celle du SF6 est en noir.

Comme indiqué sur la figure 5.3, l'amplitude a de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov est égale à la moitié de la distance entre le sommet du champignon en x_s et sa base en x_b . Les largeurs du pied l_{p1} , l_{p2} et l_{p3} sont mesurées en $x = x_b + 0.5a$, $x = x_b + a$ et $x = x_b + 1.5a$, respectivement. Enfin, la largeur de la tête l_t est donnée par la largeur maximale de l'instabilité entre $x = x_s$ et $x = x_s - 0.75a$. La frontière entre les deux gaz permettant de mesurer ces largeurs est arbitrairement définie comme la courbe où la fraction volumique est égale à 0.5.

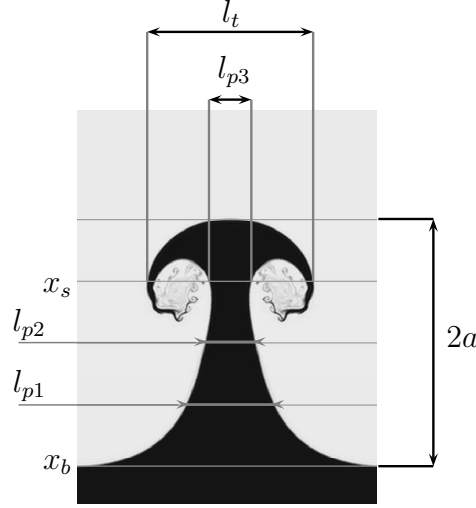


FIGURE 5.3 – Représentation schématique des paramètres géométriques de l'instabilité : amplitude a , largeurs du pied du champignon l_{p1} , l_{p2} et l_{p3} , et largeur de la tête du champignon l_t .

Les variations temporelles des largeurs du pied et de la tête du champignon sur les maillages *ny64*, *ny128*, *ny256* et *ny512*, normalisées par la largeur du domaine L sont représentées sur la figure 5.4. Les solutions tracées sur les figures 5.4(a) et 5.4(b) montrent que les largeurs l_{p1} et l_{p2} diminuent de façon monotone de $t = 0$ à $t = 6$ ms. La largeur l_{p3} sur la figure 5.4(c) décroît jusqu'à $t = 0.7$ ms, puis un pic est observé à $t \simeq 1.1$ ms. Enfin, elle diminue jusqu'à l'instant final. Les variations temporelles de la largeur de la tête du champignon l_t sont représentées sur la figure 5.4(d). De $t = 0$ à 1 ms, celle-ci décroît puis elle augmente jusqu'à la fin de la simulation.

Au cours des premiers instants, l'interface conserve une forme sinusoïdale dont l'amplitude augmente. Ainsi, la pointe de SF6 s'affine et s'allonge au cours du temps, et par conséquent sa largeur diminue. A $t \simeq 1$ ms, la tête du champignon apparaît, puis elle s'élargit, conduisant à une augmentation de sa largeur l_t . Pour les quatre largeurs l_{p1} , l_{p2} , l_{p3} et l_t , des différences significatives sont observées entre les résultats calculés sur les maillages *ny64*, *ny128* et *ny256*. Cependant, les solutions estimées à l'aide de *ny256* et *ny512* sont

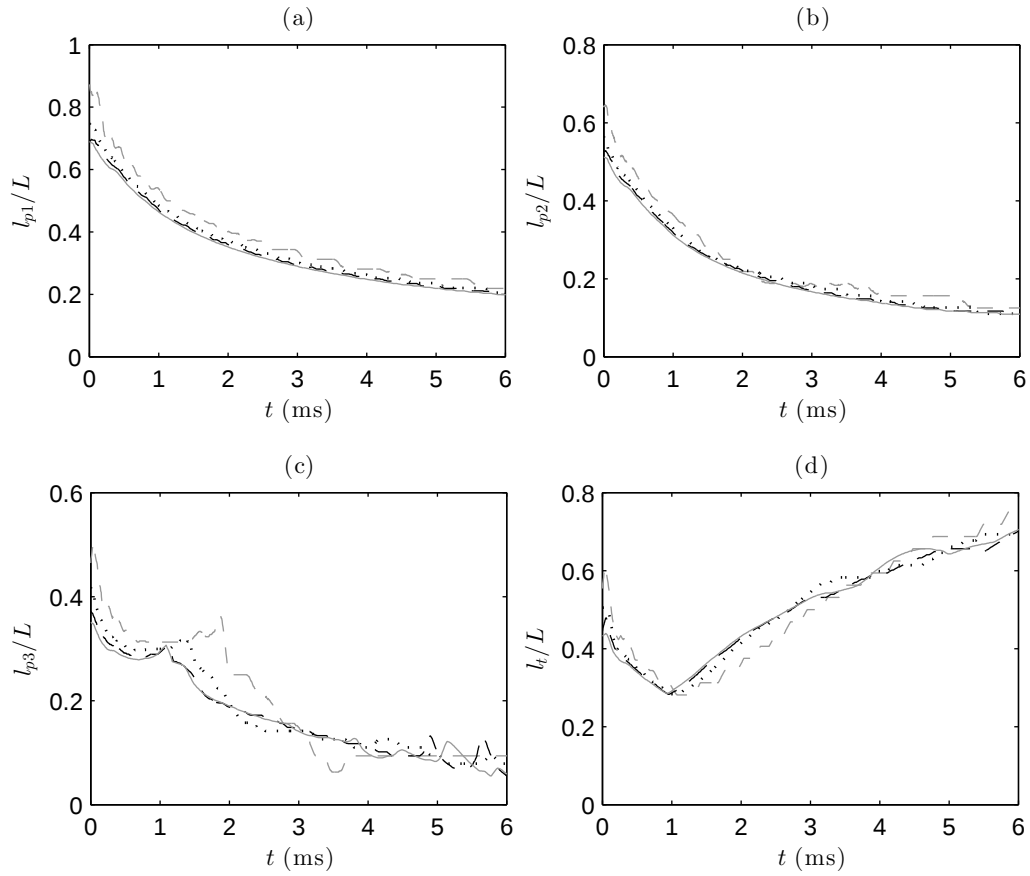


FIGURE 5.4 – Variations temporelles de la largeur du pied du champignon (a) l_{p1} , (b) l_{p2} et (c) l_{p3} , et de la tête du champignon (d) l_t , adimensionnées par la largeur du domaine de calcul L ; solutions obtenues à l'aide des maillages --- $ny64$, ... $ny128$, -.- $ny256$ et — $ny512$.

très similaires. Par conséquent, la simulation calculée à l'aide du maillage *ny256* apparaît convergée.

Il est également possible de confirmer cette convergence en comparant la dissipation numérique et la dissipation physique. Ici, la dissipation physique est liée à la viscosité de l'air et du SF6, et la dissipation numérique est introduite par le filtrage sélectif et l'intégration temporelle. Afin de comparer ces différentes contributions, les fonctions de transfert de chacune d'elles sont estimées et comparées dans l'espace des nombres d'onde $k\Delta x$ [12]. La fonction de transfert associée à la viscosité moléculaire des fluides est égale à

$$T_{visc}(k\Delta x) = \nu \left(\frac{k\Delta x}{\Delta x} \right)^2, \quad (5.2)$$

où ν est la viscosité cinématique du fluide. Celle-ci est arbitrairement choisie égale à la viscosité cinématique initiale du fluide, soit $\nu_{air} = 1.2208 \times 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ pour l'air et $\nu_{SF6} = 2.5384 \times 10^{-6} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ pour le SF6. La fonction de transfert associée au filtrage sélectif est déterminée à l'aide de l'expression suivante :

$$T^{fs}(k\Delta x) = \frac{\sigma^{fs}}{\Delta t} D(k\Delta x), \quad (5.3)$$

où $D(k\Delta x)$ est défini par l'équation (3.4) et $\sigma^{fs} = 1$. Enfin, celle de l'algorithme de Runge-Kutta utilisé pour l'intégration temporelle a pour expression :

$$T_{RK}(k\Delta x) = (1 - |G(\omega\Delta t)|)/\Delta t \quad (5.4)$$

où $G(\omega\Delta t)$ est le facteur d'amplification de l'algorithme de Runge-Kutta exprimé par la relation (3.2) et $\omega\Delta t = u(k\Delta x) \times \Delta t/\Delta x$ est la pulsation normalisée. Ici, la vitesse u est choisie égale à la vitesse moyenne d'advection de l'interface valant $V_{int} = 86.87 \text{ m.s}^{-1}$. Elle est obtenue en calculant la moyenne de la dérivée temporelle de la position du sommet du champignon x_s au cours de la simulation.

Les fonctions de transfert estimées pour les cinq maillages sont représentées en fonction du nombre d'onde normalisé $k\Delta x$ sur la figure 5.5. Quelque soit le maillage, la dissipation liée à l'intégration temporelle est nettement plus faible que la dissipation des autres contributions pour tous les nombres d'ondes. Les fonctions de transfert calculées pour le maillage *ny64* sont représentées sur la figure 5.5(a). La dissipation associée au filtrage sélectif est supérieure à la dissipation visqueuse du SF6 pour les nombres d'ondes $k\Delta x > \pi/16$ et à la dissipation visqueuse de l'air pour $k\Delta x \geq 0.3$. Par conséquent, la dissipation numérique domine la dissipation physique pour la plupart des échelles de l'écoulement. Les solutions

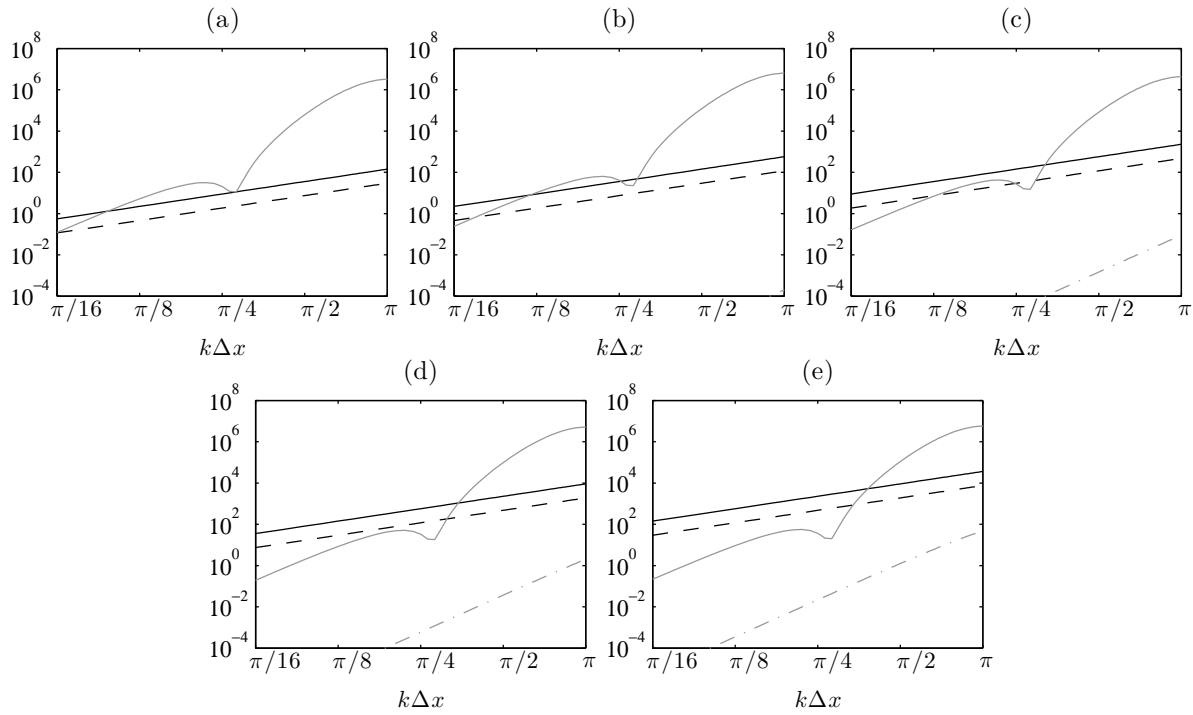


FIGURE 5.5 – Représentation des fonctions de transfert associées à ---- l'intégration temporelle, — au filtrage sélectif et à la viscosité moléculaire — de l'air et --- du SF6 en fonction du nombre d'onde normalisé $k\Delta x$ [12], estimées pour les maillages (a) *ny64*, (b) *ny128*, (c) *ny256*, (d) *ny512* et (e) *ny1024*.

obtenues pour le maillage *ny128*, représentées sur la figure 5.5(b) montrent que la dissipation visqueuse est supérieure à la dissipation numérique pour $k\Delta x \leq 0.35$ dans l'air et pour $k\Delta x \leq 0.24$ dans le SF6. La dissipation est donc due à la viscosité des fluides pour des structures discrétisées par plus de $\lambda/\Delta x = 26$ points par longueur d'onde. Les fonctions de transfert calculées pour les maillages *ny256*, *ny512* et *ny1024* sur les figures 5.5(c-e) montrent que lorsque le maillage est raffiné, les dissipations visqueuses de l'air et du SF6 deviennent supérieures à la dissipation introduite par le filtrage sélectif pour de grands nombres d'onde. Ainsi, pour les maillages les plus fins *ny512* et *ny1024*, la dissipation visqueuse domine la dissipation numérique pour des structures discrétisées par plus de $\lambda/\Delta x = 6$ points par longueur d'onde.

L'une des petites échelles spatiales rencontrées au sein du présent écoulement est l'épaisseur de l'interface δ_{99}^{int} . Afin de vérifier que l'interface n'est pas dissipée numériquement, c'est-à-dire qu'elle est discrétisée par plus de 6 points par longueur d'onde sur les maillages fins, les évolutions temporelles de l'épaisseur δ_{99}^{int} et de cette épaisseur normalisée par la dimension d'une maille Δx sont calculées le long de l'axe de symétrie de l'IRM. Elles sont représentées sur les figures 5.6(a) et 5.6(b) pour les cinq maillages. L'épaisseur de l'interface initialement égale à 5 mm augmente au cours du temps, et atteint 11.7 mm pour la

simulation réalisée à l'aide du maillage le plus grossier. Sur le maillage *ny128*, elle augmente légèrement et vaut 6.1 mm à $t = 6$ ms. En revanche, lorsque les maillages *ny256*, *ny512* et *ny1024* sont utilisés, l'épaisseur de l'interface diminue au cours du temps jusqu'à des valeurs de 1.9, 1.5 et 0.75 mm, respectivement. Par ailleurs, les variations temporelles de l'épaisseur de l'interface normalisées par la dimension d'une maille sur la figure 5.6(b) montrent qu'après $t = 3$ ms l'interface est discrétisée au minimum par environ 10 mailles quelque soit le maillage employé. Par conséquent, d'après les fonctions de transfert de la figure 5.5, les simulations réalisées à l'aide des maillages *ny256*, *ny512* et *ny1024* sont bien résolues.

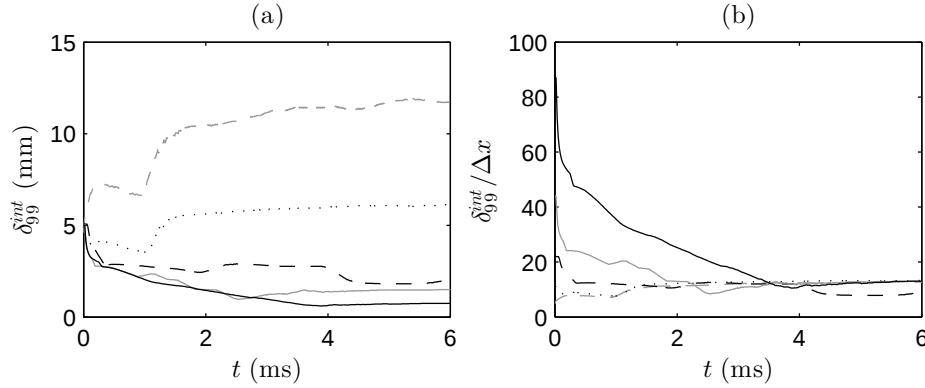


FIGURE 5.6 – Représentation des variations temporelles (a) de l'épaisseur de l'interface δ_{99}^{int} et (b) de l'épaisseur de l'interface normalisée par la dimension d'une maille $\delta_{99}^{int}/\Delta x$ estimées pour les maillages --- *ny64*, ... *ny128*, -.- *ny256*, — *ny512* et — *ny1024*.

Les variations temporelles de l'amplitude a de l'IRM sont représentées sur la figure 5.7. Les résultats obtenus à l'aide des quatre maillages *ny64*, *ny128*, *ny256*, *ny512* et *ny1024* sont superposés. L'amplitude de l'IRM est par conséquent insensible au raffinement du maillage. De plus, les résultats sont en bon accord avec les données expérimentales également représentées [42]. Après $t = 3$ ms, l'amplitude a est légèrement plus faible dans les simulations que dans les expériences. Ceci peut être dû à l'utilisation de différentes conditions initiales, ou propriétés de fluides. Dans l'expérience par exemple, la perturbation initiale de l'interface n'est pas parfaitement sinusoïdale. De plus, afin d'observer l'écoulement, l'air est mélangé avec 25% d'acétone gazeux, tandis que les viscosités et conductivités utilisés dans les simulations sont celles de l'air pur.

L'évolution temporelle de l'amplitude dépend de quatre paramètres : l'amplitude a_0 et le nombre d'onde k de la perturbation initiale de l'interface, le nombre d'Atwood A , et la vitesse de déplacement de l'interface V_{int} . Comme représentée sur la figure 5.8, l'évolution temporelle de la position de l'interface sur l'axe de symétrie de l'écoulement est linéaire et indique que la vitesse moyenne de déplacement de l'interface vaut $V_{int} = 86.87 \text{ m.s}^{-1}$.

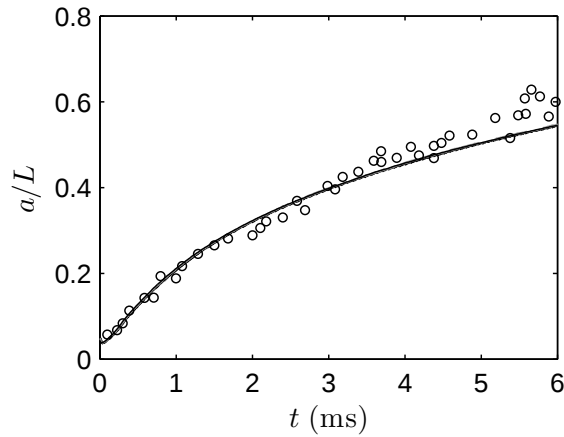


FIGURE 5.7 – Évolution temporelle de l'amplitude a de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov ; solutions obtenues à l'aide des maillages --- $ny64$, ... $ny128$, --- $ny256$, — $ny512$ et — $ny1024$; $\circ$ données expérimentales de Jacobs et Krivets [42].

La vitesse de l'interface mesurée expérimentalement est de $92.6 \pm 2 \text{ m.s}^{-1}$. La vitesse de propagation de l'interface est donc assez bien prédite par la simulation.

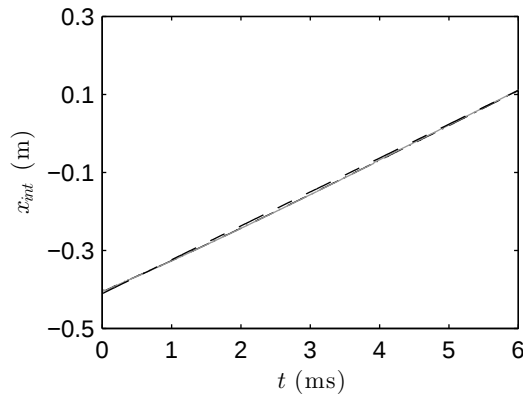


FIGURE 5.8 – Variations temporelles de la position de l'interface x_{int} le long de l'axe de symétrie de l'écoulement obtenues avec le maillage — $ny512$; --- évolution linéaire de pente égale à V_{int} .

D'après plusieurs études théoriques de l'IRM [14, 19, 31, 86], lors des premiers instants après le contact entre l'onde de choc et l'interface, l'amplitude de l'IRM évolue linéairement en fonction du temps. Ensuite, lorsque l'amplitude a devient de taille comparable à la longueur d'onde de l'interface λ_{int} , l'évolution n'est plus linéaire et le taux d'accroissement de l'amplitude diminue. Enfin, lorsque $t \rightarrow \infty$ l'amplitude évolue proportionnellement à $1/t$. L'évolution temporelle de l'amplitude de l'IRM peut être déterminée à l'aide de différents modèles empiriques, et notamment ceux proposés par Sadot *et al.* [86] et Goncharov [31]. L'intérêt de ces deux modèles est qu'ils permettent de prédire à la fois l'évolution linéaire de l'amplitude aux cours des premiers instants et l'évolution non linéaire aux temps longs.

Les modèles sont obtenus en calculant la moyenne des deux relations suivantes [19] :

$$\begin{cases} \left(\frac{da}{dt}\right)^+ = \frac{v_0(1 + v_0 kt)}{1 + (1 + A)v_0 kt + C^+ v_0^2 k^2 t^2} \\ \left(\frac{da}{dt}\right)^- = \frac{v_0(1 + v_0 kt)}{1 + (1 - A)v_0 kt + C^- v_0^2 k^2 t^2} \end{cases} \quad (5.5)$$

où v_0 est la vitesse d'accroissement de l'amplitude a au cours des premiers instants après le contact entre l'onde de choc et l'interface. Expérimentalement, cette vitesse est égale à 10.55 m.s^{-1} et la simulation effectuée à l'aide du maillage *ny512* fournit une vitesse $v_0 = 10.6 \text{ m.s}^{-1}$. Cette valeur est obtenue en calculant la moyenne de la dérivée de l'amplitude par rapport au temps au cours de la première milliseconde. Concernant le modèle de Sadot *et al.* [86], les constantes C^+ et C^- sont égales à $C^+ = 3/2$ et $C^- = 3(1 - A)/(2(1 + A))$ pour un nombre d'Atwood $A \geq 0.5$. Le modèle proposé par Goncharov [31] considère les constantes $C^+ = 3(1 + A)/(3 + A)$ et $C^- = 3(1 - A)/(3 - A)$ quelque soit la valeur du nombre d'Atwood. Pour les deux modèles, la relation (5.5) est intégrée temporellement et tracée sur la figure 5.9. La solution obtenue à l'aide du maillage *ny512* ainsi que les données expérimentales de Jacobs et Krivets [42] sont également représentées. Toutes les données sont normalisées à l'aide du nombre d'onde k et de l'amplitude a_0 de la perturbation initiale de l'interface. Le temps est également normalisé par la vitesse initiale de l'amplitude v_0 et le nombre d'onde k . Pour un temps $kv_0 t < 2.5$, toutes les solutions tracées sont similaires. Au delà de $kv_0 t = 2.5$, le modèle de Sadot *et al.* [86] est en assez bon accord avec l'évolution temporelle de l'amplitude mesurée expérimentalement [42] et l'évolution obtenue numériquement est proche de celle prédite par le modèle de Goncharov [31].

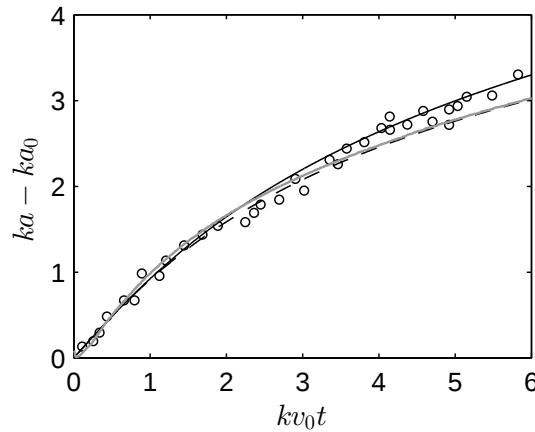


FIGURE 5.9 – Variations temporelles de l'amplitude $ka - ka_0$ en fonction du temps tkv_0 ; solution numérique obtenue à l'aide du maillage — *ny512* comparée aux $\circ$ données expérimentales [42] ainsi qu'aux modèles de — Sadot *et al.* [86] et - - - Goncharov [31].

5.1.4 Influence de la procédure de capture des discontinuités

L'influence de la procédure de capture des discontinuités sur la forme de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov est maintenant étudiée. Pour cela, les champs de densité obtenus aux temps $t = 1.76$, 3.06 et 4.96 ms, avec et sans la procédure de capture des discontinuités sont présentés sur la figure 5.10. Au premier instant, sur la figure 5.10(a), les deux solutions sont assez similaires. Les spirales de SF6 créées de part et d'autre du pied du champignon sont atténuées lorsque la procédure de capture est utilisée. Au second instant, sur la figure 5.10(b), de petites oscillations apparaissent sur le sommet et le pied du champignon lorsque la procédure de capture est employée. De plus, les petites structures visibles sur la solution obtenue sans la procédure de capture à gauche et à droite du pied du champignon sont significativement dissipées par le filtrage des discontinuités. Enfin, au dernier instant, sur la figure 5.10(c), les deux solutions sont significativement différentes. Lorsque la procédure de capture de choc est utilisée, des oscillations se développent sur l'interface et les petites structures de l'écoulement sont fortement dissipées. Des oscillations similaires ont été observées numériquement par Trischtler *et al.* [105] et par Latini *et al.* [60], mais leur origine est toujours incertaine. L'influence du maillage sur le développement de ces oscillations est illustrée en comparant les solutions des trois simulations effectuées sur les maillages *ny256*, *ny512* et *ny1024* avec la procédure de capture des discontinuités. Les champs de densité obtenus aux temps $t = 3.06$ et 4.96 ms sont montrés sur la figure 5.11. Aux deux instants, les solutions calculées sur le maillage le plus grossier sont très dissipées. Peu d'oscillations sont observées sur la tête du champignon. En revanche, le pied du champignon présente de nombreuses perturbations. En raffinant le maillage, les oscillations sur la tête du champignon sont plus nombreuses et de plus forte amplitude. A l'inverse, l'amplitude des perturbations sur le pied du champignon diminue avec la dimension des mailles.

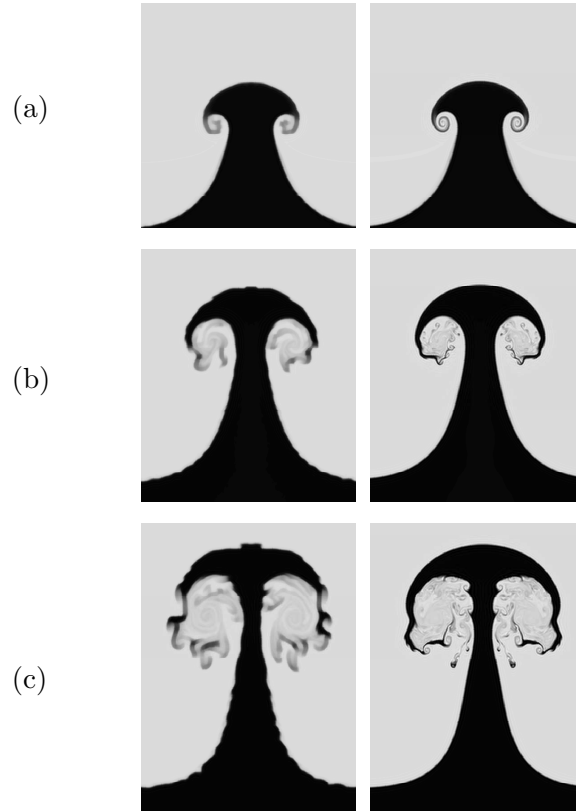


FIGURE 5.10 – Champs de masse volumique obtenus aux temps (a) $t = 1.76$ ms, (b) $t = 3.06$ ms et (c) $t = 4.96$ ms à l'aide du maillage *ny512* en utilisant la procédure de capture des discontinuités (première colonne) et sans l'utiliser (deuxième colonne). La masse volumique du mélange air-acétone est en gris et celle du SF6 est en noir.

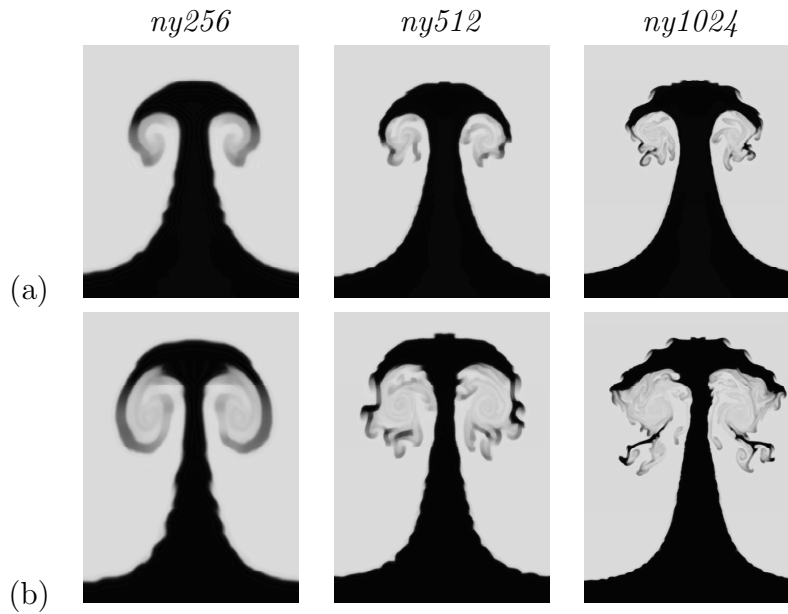


FIGURE 5.11 – Champs de masse volumique obtenus aux temps (a) $t = 3.06$ ms et (b) $t = 4.96$ ms à l'aide des maillages *ny256* (première colonne), *ny512* (deuxième colonne) et *ny1024* (troisième colonne) en utilisant la procédure de capture des discontinuités. La masse volumique du mélange air-acétone est en gris et celle du SF6 est en noir.

5.2 Onde de choc impactant une bulle cylindrique

Le second écoulement considéré a été étudié expérimentalement par Haas et Sturtevant [33]. Il concerne une onde de choc se propageant dans l'air et impactant une bulle cylindrique remplie d'hélium ou de chlorodifluorométhane (R22). Ainsi, la simulation 2-D est représentative de la configuration expérimentale. Deux cas sont considérés : une onde de choc se propageant d'un gaz lourd (air) vers un gaz léger (hélium), et une autre d'un gaz léger (air) vers un gaz lourd (R22). Des expériences similaires ont été effectuées pour des bulles sphériques par Layes *et al.* [62]. Celles-ci ont aussi été simulées en tenant compte des effets visqueux par Giordano et Burtschell [28].

5.2.1 Conditions initiales

La configuration initiale utilisée pour les simulations numériques est schématisée sur la figure 5.12. Identiquement à l'expérience, la largeur du domaine est égale à $L = 8.9$ cm. La bulle cylindrique de diamètre $D = 5$ cm est centrée le long de la direction y . L'onde de choc est initialement créée dans l'air à l'abscisse x_c et se propage de droite à gauche avec un nombre de Mach $M_a = 1.22$. Les conditions initiales pour la masse volumique, la vitesse axiale, la pression et le paramètre γ sont les suivantes :

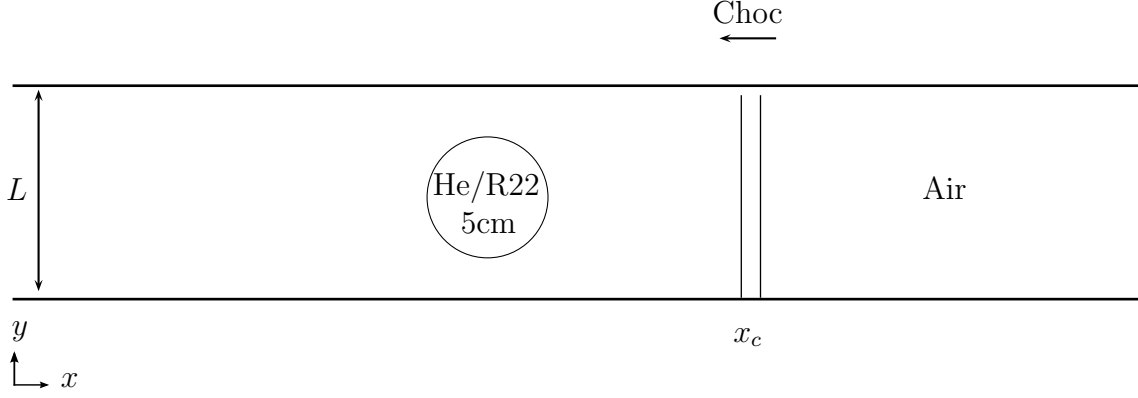


FIGURE 5.12 – Configuration initiale pour l'étude d'une onde de choc se propageant dans l'air à $M_a = 1.22$ et impactant une bulle cylindrique d'hélium ou de R22 [33].

$$(\rho, u, p, \gamma) = \begin{cases} (1.66 \text{ kg.m}^{-3}, -114 \text{ m.s}^{-1}, 159080.98 \text{ Pa}, 1.4) & \text{si } x > x_c \\ (1.2062 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 101325 \text{ Pa}, 1.4) & \text{dans l'air, si } x \leq x_c \\ (0.2204 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 101325 \text{ Pa}, 1.6451) & \text{dans la bulle d'hélium} \\ (3.5965 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 101325 \text{ Pa}, 1.1847) & \text{dans la bulle de R22} \end{cases}$$

Expérimentalement, la forme cylindrique de la bulle est imposée en utilisant une membrane solide d'une épaisseur de $0.5 \mu\text{m}$. A cause de la perméabilité de cette membrane, l'hélium contenu dans la bulle est composée à 28 % d'air. Par conséquent, les fractions massiques d'hélium et d'air dans la bulle sont respectivement égales à $Y_{He} = 0.72$ et $Y_{air} = 0.28$. La masse molaire de ce mélange hélium-air $\mathcal{M}_{ha}$, obtenue à l'aide de l'équation (2.23) est donc égale à

$$\mathcal{M}_{ha} = \left(\frac{0.28}{\mathcal{M}_{He}} + \frac{0.72}{\mathcal{M}_{air}} \right)^{-1} = 5.3 \text{ g.mol}^{-1},$$

où $\mathcal{M}_{air} \simeq 29 \text{ g.mol}^{-1}$ est la masse molaire de l'air et $\mathcal{M}_{He} = 4.0026 \text{ g.mol}^{-1}$ est la masse molaire de l'hélium. Les capacités calorifiques à pression et volume constants du mélange hélium-air, $c_{p,ha}$ et $c_{v,ha}$ sont déterminées par

$$\begin{cases} c_{p,ha} = Y_{He}c_{p,He} + Y_{air}c_{p,air} = 4026 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}, \\ c_{v,ha} = Y_{He}c_{v,He} + Y_{air}c_{v,air} = 2447.3 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}, \end{cases}$$

où les capacités calorifiques de l'hélium sont $c_{p,He} = 5201 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et $c_{v,He} = 3120 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$, et celles de l'air sont $c_{p,air} = 1004.5 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et $c_{v,air} = 717.5 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Ainsi, le rapport

	n_x	n_y	nombre de mailles
R_0100	2000	356	712×10^3
R_0200	4000	712	2.85×10^6
R_0400	8000	1424	11.4×10^6
R_0800	16000	2848	23×10^6

TABLEAU 5.2 – Nombres de mailles n_x et n_y dans les directions x et y , constituant les maillages R_0100 , R_0200 , R_0400 et R_0800 .

des capacités calorifiques du mélange hélium-air γ_{ha} vaut

$$\gamma_{ha} = \frac{c_{p,ha}}{c_{v,ha}} = 1.6451 .$$

Les masses volumiques ρ_{ha} , ρ_{R22} et ρ_{air} du mélange hélium-air, du R22 et de l'air en aval de l'onde de choc sont estimées à l'aide de la relation des gaz parfaits :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_{ha} = \frac{p}{T} \frac{\mathcal{M}_{ha}}{R_u} = 0.2204 \text{ kg.m}^{-3} \\ \rho_{R22} = \frac{p}{T} \frac{\mathcal{M}_{R22}}{R_u} = 3.5965 \text{ kg.m}^{-3} \\ \rho_{air} = \frac{p}{T} \frac{\mathcal{M}_{air}}{R_u} = 1.2062 \text{ kg.m}^{-3} \end{array} \right.$$

où $\mathcal{M}_{R22} = 82.47 \text{ g.mol}^{-1}$ est la masse molaire du R22, et $T = 293 \text{ K}$ et $p = 101325 \text{ Pa}$ sont la température et la pression choisies comme conditions en aval du choc.

5.2.2 Paramètres numériques

Dans les calculs, les parois supérieure et inférieure du tube à choc, espacées d'une distance $L = 8.9 \text{ cm}$, sont modélisées par des conditions aux limites périodiques. Des conditions de rayonnement sont imposées aux frontières amont et aval du domaine [102]. Quatre maillages uniformes contenant 100, 200, 400 et 800 mailles dans le rayon initial de la bulle R_0 , notés R_0100 , R_0200 , R_0400 et R_0800 sont utilisés. Les nombres de mailles dans les directions x et y sont donnés dans le tableau 5.2 pour ces maillages.

Afin de considérer les mêmes conditions initiales pour les différents maillages, les épaisseurs de l'interface et du choc sont fixées à l'aide du profil en tangente hyperbolique défini par l'équation (5.1). Ces épaisseurs sont arbitrairement fixées à $3\Delta x$ sur le maillage R_0100 . Ainsi, elles sont égales à $6\Delta x$, $12\Delta x$ et $24\Delta x$ sur les maillages R_0200 , R_0400 et R_0800 .

Le pas de temps Δt est estimé à partir du nombre CFL calculé pour la vitesse du son maximale c_{max} , tel que $CFL = c_{max}\Delta t/\Delta x = 0.9$. Pour la bulle d'hélium, la vitesse du son

est maximale dans le mélange hélium-air $c_{ha} = 869 \text{ m.s}^{-1}$ et pour la bulle de R22 elle est maximale dans l'air $c_{air} = 342.9 \text{ m.s}^{-1}$.

Enfin, les bulles cylindriques d'hélium et de R22 sont simulées en utilisant la méthode de capture des discontinuités introduite au paragraphe 3.4.

5.2.3 Bulle d'hélium

Les solutions obtenues aux temps $t = 32, 82, 102, 245, 427$ et $674 \mu\text{s}$ pour la bulle d'hélium avec le maillage $R_0 200$ sont présentées sur la figure 5.13. L'instant $t = 0$ correspond au moment où le premier contact entre l'onde de choc et l'interface de la bulle a lieu. Les résultats numériques sont montrés sur la moitié inférieure des images et sont comparés aux visualisations expérimentales [33] données sur la moitié supérieure des images. Les résultats expérimentaux sont des visualisations par ombroscopie tandis que les solutions numériques sont des images Schlieren représentant la norme du gradient de la masse volumique $|\nabla\rho|$ [20, 28, 78, 95]. Le cercle en pointillés noirs indique la position initiale de la bulle.

Sur la figure 5.13(a), la partie amont de l'interface est aplatie suite à l'impact de l'onde de choc. Trois ondes de pression apparaissent alors : une onde réfléchie se propageant dans l'air dans la direction amont, une onde réfractée se déplaçant dans la direction aval à l'intérieur de la bulle, et l'onde de choc incidente en aval, au-dessus et en-dessous de la bulle. Sur la figure 5.13(b), la bulle a légèrement été déplacée vers la gauche. Comme la vitesse du son est plus élevée dans l'hélium que dans l'air, l'onde réfractée est sortie de la bulle alors que l'onde de choc est toujours au-dessus et en-dessous de la bulle. Enfin, sur les figures 5.13(d-f), le côté droit de l'interface pénètre la bulle, donnant une forme de rein à la bulle. Les ondes de pression ne sont pas exactement aux mêmes positions sur les visualisations numériques et expérimentales. Cependant, les déformations de la bulle sont en bon accord à chaque instant.

Les images Schlieren numériques obtenues avec les maillages $R_0 100$, $R_0 200$ et $R_0 400$ à $t = 32$ et $t = 674 \mu\text{s}$ sont présentées sur la figure 5.14. Au premier instant, sur la figure 5.14(a), aucune différence significative n'est observée entre les solutions. Les lignes noires indiquant les forts gradients de masse volumique sont plus fines sur le maillage le plus raffiné que sur les deux autres. Les discontinuités sont donc plus raides lorsque le maillage est plus fin. Au second instant, sur la figure 5.14(b), les déformations de la bulle sont similaires sur les trois maillages. En revanche, les petites structures sur l'interface sont mieux résolues sur les maillages $R_0 200$ et $R_0 400$.

Les variations temporelles des positions x_{ui} et x_{di} des deux points amont et aval de l'interface sont représentées sur les figures 5.15(a) et 5.15(b). Ces points sont localisés sur

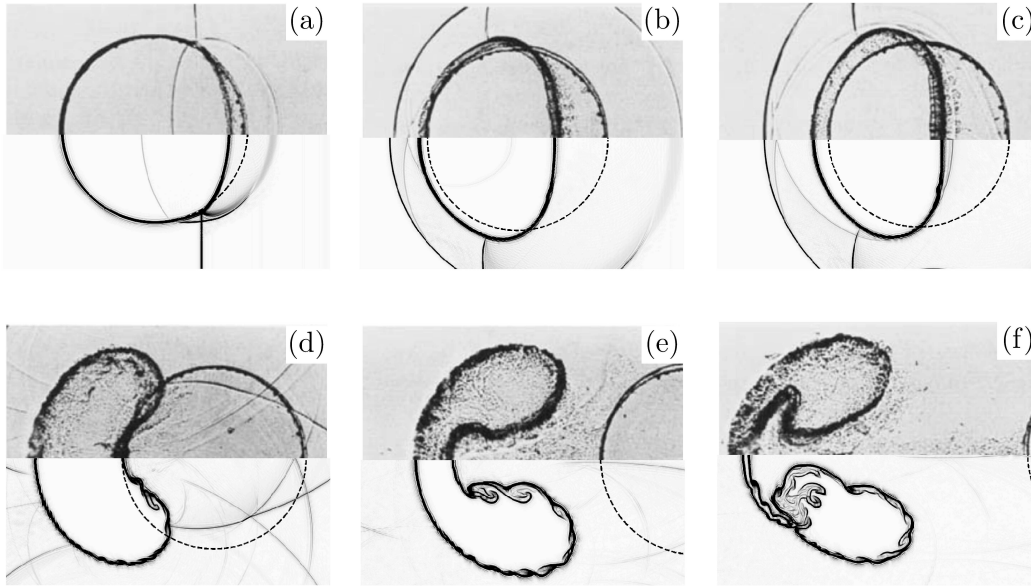


FIGURE 5.13 – Bulle d'hélium : images Schlieren numériques (demi images inférieures) obtenues avec $R_0 200$ et visualisations expérimentales par ombroscopie (demi images supérieures) [33] à (a) $t = 32 \mu s$, (b) $t = 82 \mu s$, (c) $t = 102 \mu s$, (d) $t = 245 \mu s$, (e) $t = 427 \mu s$ et (f) $t = 674 \mu s$.

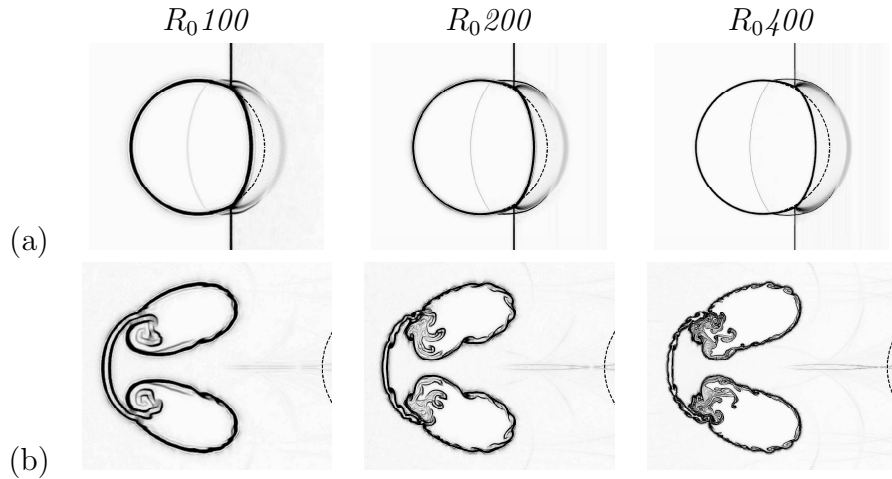


FIGURE 5.14 – Bulle d'hélium : images Schlieren numériques obtenues à (a) $t = 32 \mu s$ et (b) $t = 674 \mu s$ à l'aide des maillages $R_0 100$ (première colonne), $R_0 200$ (seconde colonne) et $R_0 400$ (troisième colonne).

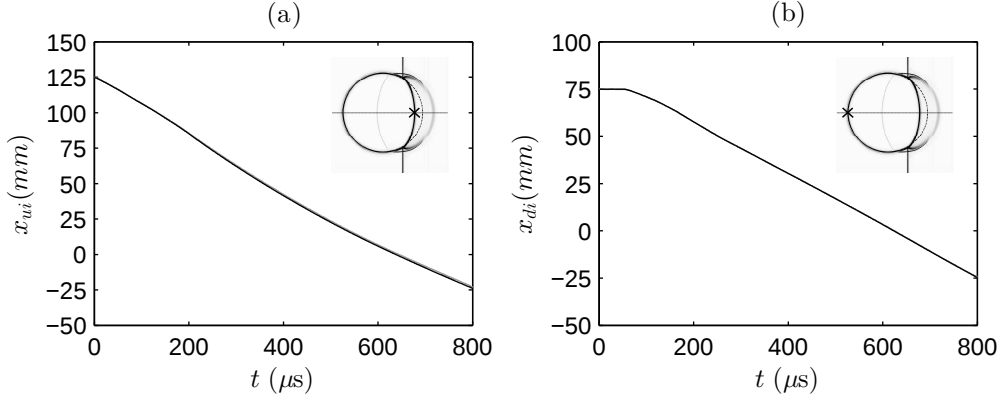


FIGURE 5.15 – Bulle d’hélium : variations temporelles des positions des points (a) amont x_{ui} et (b) aval x_{di} de l’interface obtenues en utilisant — R_0100 , --- R_0200 et — R_0400 . Ces positions sont indiquées par $\times$ sur les figures dans le coin supérieur droit.

l’axe de symétrie de la bulle, à l’endroit où la fraction volumique est égale à 0.5. Les solutions obtenues en utilisant les maillages R_0100 , R_0200 et R_0400 sont tracées. La position du point amont x_{ui} décroît de façon monotone durant toute la simulation tandis que la position du point aval x_{di} est constante jusqu’à $t = 54 \mu s$ et diminue ensuite. Ceci est lié au fait que l’onde de choc est en contact avec la partie amont de l’interface à $t = 0$ et que la partie aval de l’interface commence à être mise en mouvement après son interaction avec l’onde réfractée à $t = 54 \mu s$. Les évolutions temporelles des deux positions x_{ui} et x_{di} sont identiques pour tous les maillages. Par conséquent, le maillage le plus grossier semble être suffisant.

Une autre manière de vérifier que les solutions ne dépendent pas du maillage consiste à comparer la dissipation visqueuse et la dissipation numérique. Comme précédemment pour les simulations de l’instabilité de Richtmyer-Meshkov, les fonctions de transfert associées aux mécanismes de dissipation physique et numérique sont calculées pour la bulle d’hélium. L’ensemble des simulations sont ici réalisées en utilisant la méthode de capture des discontinuités. Par conséquent, la dissipation introduite par le filtrage des discontinuités doit également être prise en compte. La fonction de transfert associée à ce filtrage est égale à [12] :

$$T^{fd}(k\Delta x) = \frac{\sigma^{fd}}{\Delta t} D_{real}(k\Delta x), \quad (5.6)$$

où $D_{real}(k\Delta x)$ est défini par l’équation (3.11) et σ^{fd} est arbitrairement fixée égale à 1 afin de considérer le cas où la dissipation est maximale. La fonction de transfert liée à la viscosité moléculaire définie par l’équation (5.2) est estimée pour une viscosité cinématique constante égale à la viscosité initiale, soit $\nu_{air} = 1.2208 \times 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ pour l’air et $\nu_{He} = 9.0064 \times 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ pour l’hélium. Pour la fonction de transfert associée à l’intégration temporelle, la relation (5.4) est utilisée. Il est alors nécessaire de traduire la pulsation normalisée $\omega\Delta t$ en

nombre d'onde normalisé $k\Delta x$ à l'aide de l'égalité $\omega\Delta t = u(k\Delta x) \times \Delta t/\Delta x$. Ici, la vitesse u est choisie égale à la vitesse de l'onde de choc se propageant dans l'air qui vaut $u_c = 417.8$ m.s⁻¹. La même vitesse u est considérée pour les bulles d'hélium et de R22.

Les fonctions de transfert estimées pour les maillages R_0100 et R_0400 sont représentées sur la figure 5.16. Pour tous les nombres d'onde, la dissipation liée à l'intégration temporelle est la plus faible. Les dissipations visqueuses de l'air et de l'hélium se révèlent être supérieures à la dissipation du filtrage sélectif pour des structures discrétisées par plus de 6 points par longueur d'onde sur R_0100 et par plus de 5 points par longueur d'onde sur R_0400 . Enfin, pour les nombres d'onde considérés, la dissipation introduite par le filtrage des discontinuités est supérieure à la dissipation visqueuse. Cependant, ce filtre est appliqué occasionnellement autour des discontinuités et avec une intensité variable.

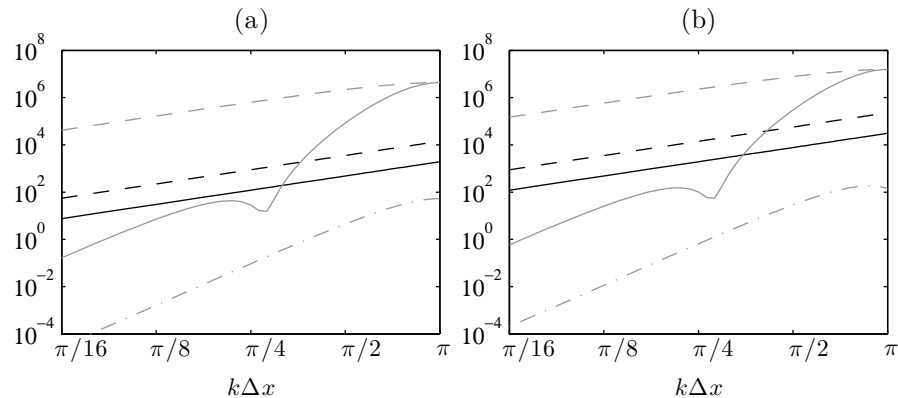


FIGURE 5.16 – Bulle d'hélium : représentation des fonctions de transfert associées à . . . l'intégration temporelle, — au filtrage sélectif, --- au filtrage des discontinuités et à la viscosité moléculaire — de l'air et - - - de l'hélium en fonction du nombre d'onde normalisé $k\Delta x$ [12], pour les maillages (a) R_0100 et (b) R_0400 .

Afin de vérifier que les structures de l'écoulement sont discrétisées par au moins 6 points, on peut s'intéresser à l'épaisseur de l'interface. Le calcul de cette épaisseur est effectué au point amont de l'interface x_{ui} sur l'axe de symétrie de la bulle. Les variations temporelles de l'épaisseur de l'interface δ_{99}^{int} et du rapport entre cette épaisseur et la taille d'une maille Δx estimées pour les maillages R_0100 , R_0200 et R_0400 sont tracées sur les figures 5.17(a) et 5.17(b). L'épaisseur δ_{99}^{int} est arbitrairement définie comme la distance entre les positions où la fraction volumique est égale à 0.01 et 0.99. Dans les trois cas, elle est initialement égale à 0.75 mm. Lorsque le maillage grossier est employé, l'épaisseur de l'interface augmente fortement dès les premiers instants. Elle atteint ensuite un maximum de 3.3 mm à $t = 200$ μ s, puis elle diminue jusqu'à 2 mm à 400 μ s. L'épaisseur de l'interface calculée sur le maillage R_0200 présente deux maxima d'environ 1.7 mm à $t = 0$ et à $t = 200$ μ s, puis elle décroît lentement, et atteint 1 mm à l'instant final. Enfin, l'épaisseur δ_{99}^{int} estimée sur

le maillage R_0400 est relativement constante au cours du temps. Par ailleurs, l'interface contient approximativement le même nombre de points compris entre 8 et 14, sur les trois maillages. Par conséquent, lorsqu'un maillage grossier est utilisé, l'interface est dissipée par les méthodes numériques. En revanche, lorsque la simulation est réalisée à l'aide d'un maillage fin, l'interface est suffisamment bien discrétisée pour que la dissipation visqueuse des fluides domine la dissipation introduite par le filtrage sélectif.

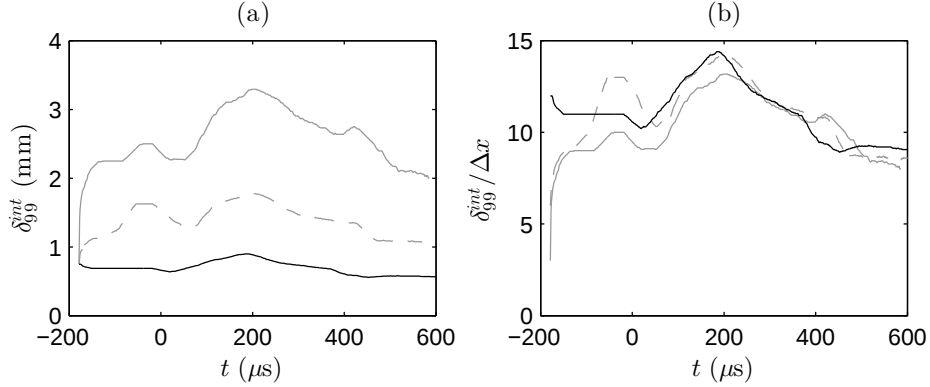


FIGURE 5.17 – Bulle d'hélium : variations temporelles (a) de l'épaisseur de l'interface δ_{99}^{int} au point x_{ui} et (b) du rapport $\delta_{99}^{int}/\Delta x$ pour les maillages — R_0100 , --- R_0200 et — R_0400 .

Afin de vérifier que les méthodes numériques permettent de conserver la masse, la masse du mélange hélium-air m_{ha} contenu dans la bulle peut être estimée en intégrant la masse volumique sur la surface de la bulle S , tel que

$$m_{ha} = \iint_S \rho \, dx dy.$$

En pratique, la surface de la bulle étant inconnue, la masse de la bulle est calculée à partir du produit de la fraction massique du mélange hélium-air Y_{ha} et de la masse volumique. Ce produit est intégré sur le domaine de calcul Σ de la façon suivante :

$$m_{ha} = \iint_{\Sigma} Y_{ha} \rho \, dx dy. \quad (5.7)$$

L'erreur sur la masse est définie comme la différence entre la masse initiale m_{ha}^0 et la masse m_{ha}^t à l'instant t , normalisée par m_{ha}^0 :

$$\Delta m_{ha} = \frac{|m_{ha}^t - m_{ha}^0|}{m_{ha}^0}. \quad (5.8)$$

Les variations temporelles de la masse m_{ha} et de l'erreur Δm_{ha} obtenues pour les maillages

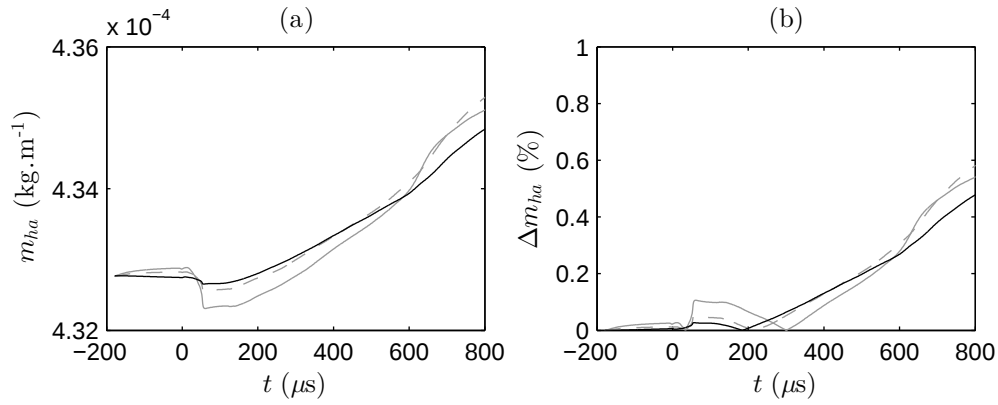


FIGURE 5.18 – Variations temporelles de (a) la masse de la bulle d'hélium m_{ha} et de (b) l'erreur sur la masse Δm_{ha} ; solutions obtenues avec — R_0100 , --- R_0200 et — R_0400 .

	u_c (m.s ⁻¹)	u_r (m.s ⁻¹)	u_t (m.s ⁻¹)	u_{ui} (m.s ⁻¹)	u_{di} (m.s ⁻¹)
expérience	410 ± 41	900 ± 90	393 ± 39.3	170 ± 17	145 ± 14.5
simulation	417.8	949.4	377.5	181.6	138.9

TABLEAU 5.3 – Bulle d'hélium : vitesses moyennes du choc incident u_c , de l'onde réfractée u_r , de l'onde transmise u_t , et des points amont et aval de l'interface u_{ui} et u_{di} , en m.s⁻¹.

R_0100 , R_0200 et R_0400 sont présentées sur les figures 5.18(a) et 5.18(b). La masse de la bulle est quasiment constante avant $t = 0$, puis diminue légèrement juste après $t = 0$. Cette diminution est plus faible sur le maillage le plus raffiné. Aux temps ultérieurs, la masse augmente de façon monotone pour les trois maillages. Les variations de la masse restent cependant très faibles, atteignant une erreur maximale de seulement 0.58 % sur R_0100 et 0.48 % sur R_0400 .

Les vitesses moyennes des différentes ondes de pression, estimées le long de l'axe de symétrie de la bulle, sont comparées aux mesures expérimentales dans le tableau 5.3. La vitesse u_c du choc incident est calculée de l'instant $t = -180 \mu s$ jusqu'à $t = 0$. La vitesse u_r de l'onde réfractée est estimée au cours de sa propagation dans la bulle. L'onde transmise se propage dans l'air dans la direction aval à la vitesse u_t . Enfin, les vitesses de déplacement des points amont et aval de l'interface sont notées u_{ui} et u_{di} , respectivement. Les résultats numériques sont comparables aux mesures expérimentales. Dans la simulation, la vitesse de l'onde réfractée vaut 948 m.s^{-1} , ce qui est supérieur à la vitesse dans l'expérience mais similaire à celle de 945 m.s^{-1} obtenue numériquement par Coralic et Colonius [20]. Cet écart entre expérience et simulation est visible sur la figure 5.13(a), où les ondes de pression dans la bulle ne coïncident pas parfaitement. Il est possible que cet écart soit dû à une différence de concentration d'air initialement contenue dans l'hélium.

Influence de la concentration d'air initiale contenue dans la bulle d'hélium

Dans l'expérience, la concentration d'air contenue dans la bulle d'hélium est estimée à $Y_{air} = 28 \%$. Afin de montrer l'influence de cette concentration sur la propagation de l'onde transmise dans la bulle, trois simulations ont été effectuées pour des valeurs de concentrations massiques $Y_{air} = 28, 50$ et 60% dans la bulle. Les images Schlieren obtenues avec le maillage $R_0 200$ sont comparées aux visualisations expérimentales [32, 33] à $t = 12, 22, 32$ et $82 \mu s$ sur la figure 5.19. Aux trois premiers instants, sur les figures 5.19(a-c), la déformation de l'interface est très proche de celle observée dans l'expérience lorsque la concentration d'air contenue dans la bulle d'hélium est égale à 50 et 60 %. La position de l'onde réfractée se propageant dans la bulle est en meilleur accord avec l'expérience lorsque la concentration massique d'air est égale à $Y_{air} = 60 \%$. L'écart entre les positions de l'onde réfractée dans la simulation et dans l'expérience n'est par ailleurs pas constant au cours du temps. Ceci peut être lié au fait que les visualisations expérimentales sont obtenues lors d'expériences indépendantes. Par conséquent, il est possible que la concentration d'air contenue dans la bulle d'hélium ne soit pas identique pour l'ensemble des réalisations. Enfin, au dernier instant, sur la figure 5.19(d) la position de l'onde transmise se propageant en aval de la bulle est en assez bon accord avec les résultats expérimentaux lorsque la fraction massique est égale à 28 % et 50%. En revanche, un écart important est observé pour une fraction massique d'air égale à 60 %. Par ailleurs, la déformation de la bulle obtenue pour une concentration de 60 % est en très bon accord avec la déformation observée expérimentalement.

Par conséquent, la concentration d'air contenue initialement dans la bulle d'hélium semble avoir une influence non négligeable sur la vitesse de propagation des ondes de pression et sur la déformation de l'interface. Cependant, cette concentration est difficile à estimer expérimentalement, d'autant plus qu'elle peut varier d'une expérience à une autre.

Influence du nombre de Reynolds

Afin de mettre en évidence l'influence des effets visqueux sur la déformation de la bulle d'hélium, une simulation a été effectuée au sein d'un domaine de calcul dix fois plus petit. La bulle possède alors un diamètre de 5 mm, et la largeur du domaine vaut $L/10 = 8.9$ mm. Les images Schlieren obtenues aux temps $t = 245, 427$ et $674 \mu s$ sur le maillage $R_0 200$, pour un domaine de largeur L et $L/10$ sont comparées sur la figure 5.20. Dans les deux cas, les solutions à $t = 245 \mu s$ sont très similaires. En revanche, à $t = 427$ et $674 \mu s$, les effets visqueux sont clairement visibles. L'interface est en effet nettement moins déformée sur les images obtenues pour un domaine de calcul de largeur $L/10$.

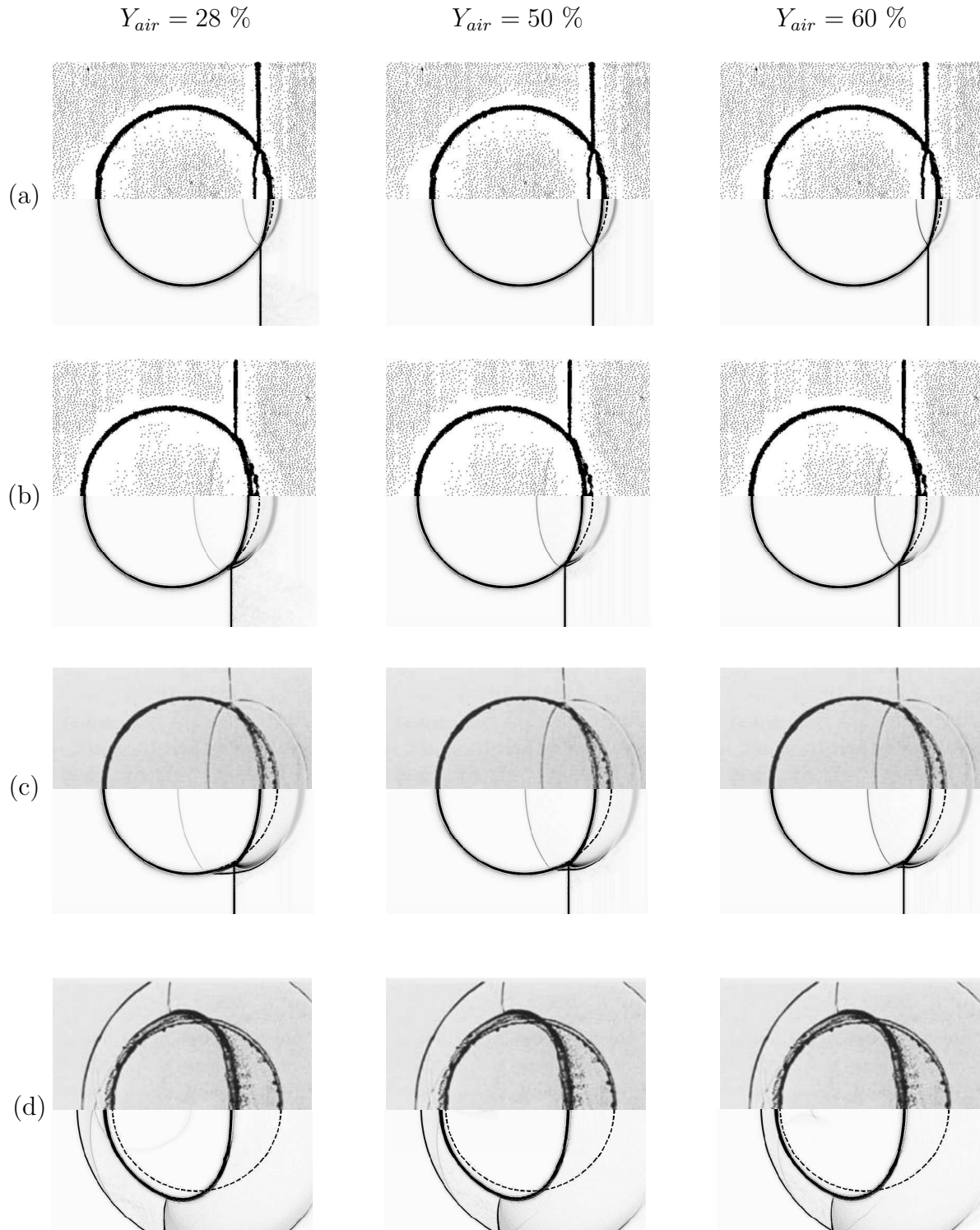


FIGURE 5.19 – Bulle d'hélium : images Schlieren numériques (demi images inférieures) et visualisations expérimentales par ombroscopie (demi images supérieures) [32, 33] obtenus à (a) $t = 12 \mu s$, (b) $t = 22 \mu s$, (c) $t = 32 \mu s$ et (d) $t = 82 \mu s$. Solutions numériques obtenues à l'aide du maillage $R_0 200$ pour une fraction massique d'air contenue dans la bulle d'hélium à $t = 0$ égale à $Y_{air} = 28\%$ (première colonne), $Y_{air} = 50\%$ (seconde colonne) et $Y_{air} = 60\%$ (troisième colonne).

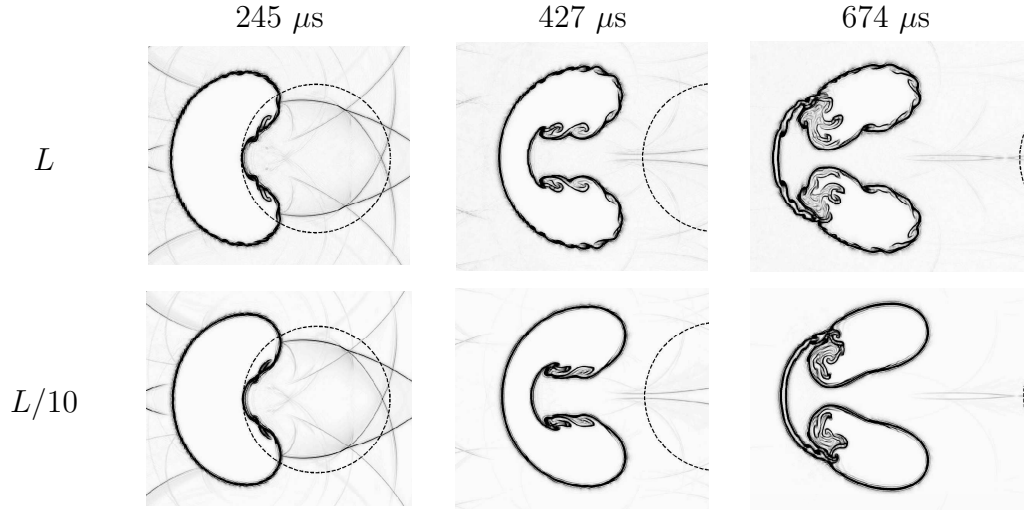


FIGURE 5.20 – Bulle d’hélium : images Schlieren numériques obtenues à $t = 245 \mu\text{s}$ (première colonne), $t = 427 \mu\text{s}$ (deuxième colonne) et $t = 674 \mu\text{s}$ (troisième colonne) avec le maillage $R_0 200$ pour un domaine de calcul de largeur L (première rangée) et de largeur $L/10$ (deuxième rangée).

5.2.4 Bulle de R22

Les résultats obtenus aux instants $t = 55, 115, 135, 187, 247$ et $417 \mu\text{s}$ pour la bulle de R22 sur le maillage $R_0 200$ sont présentés sur la figure 5.21. Ils sont comparés aux visualisations expérimentales par ombroscopie. Sur les figures 5.21(a-b), l’onde réfractée se propage dans la bulle plus lentement que l’onde de choc incidente. Par conséquent, sur la figure 5.21(c), l’onde réfractée est toujours dans la bulle tandis que le choc est en aval de la bulle. Aux instants ultérieurs, sur les figures 5.21(e-f), l’onde réfractée est sortie de la bulle et une onde transmise est observée. De plus, la bulle a légèrement été déplacée vers la gauche et le côté aval de l’interface pénètre dans la bulle provoquant la formation d’un pic sur l’axe de la bulle. Ce phénomène est lié à la vorticit  de l’ coulement qui est orient e dans le sens trigonom trique dans la demi-partie sup rieure du domaine et dans le sens horaire dans la demi-partie inf rieure.

Il est  galement possible d’observer au dernier instant que la couche de m lange   l’interface s’enroule. En effet, ce ph nom ne est d    la vorticit  barocline [79] qui est li e   l’orientation diff rente entre les gradients de pression et de masse volumique. Les instabilit s ainsi cr  es   l’interface sont clairement observ es dans la simulation. Elles ont aussi  t  remarqu es dans les travaux num riques de Hejazialhosseini *et al.* [36], So *et al.* [95] et Daude *et al.* [24]. Il est possible que ces instabilit s soient difficiles   distinguer sur les images exp rimentales   cause de l’acquisition des images dans la direction transverse le long de la bulle cylindrique, sur une longueur de 8.8 cm. De plus, le d veloppement de ces instabilit s  tant sensible   l’ paisseur initiale de l’interface [95], il est possible que l’utilisation d’une

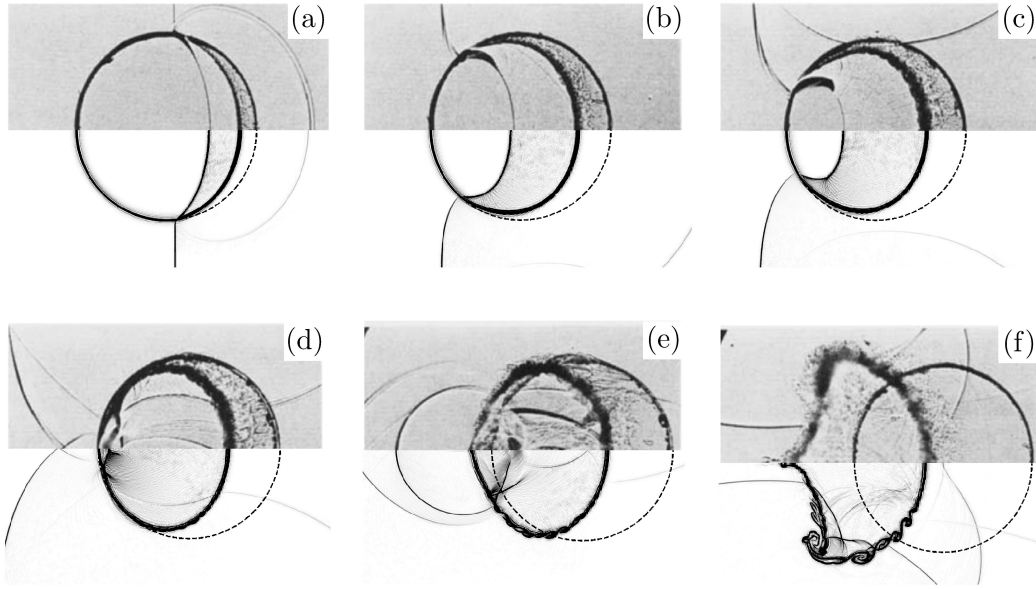


FIGURE 5.21 – Bulle de R22 : images Schlieren numériques (moitiés inférieures des images) et visualisations expérimentales par ombroscopie (moitiés supérieures des images) [33] obtenues à (a) $t = 55 \mu s$, (b) $t = 115 \mu s$, (c) $t = 135 \mu s$, (d) $t = 187 \mu s$, (e) $t = 247 \mu s$ et (f) $t = 417 \mu s$.

membrane solide modifie ce développement.

L'influence du maillage sur la déformation de la bulle est étudiée en comparant les images Schlieren obtenues à $t = 55$ et $417 \mu s$ avec $R_0 100$, $R_0 200$, $R_0 400$ et $R_0 800$ sur la figure 5.22. Au premier instant, sur la figure 5.22(a), la forme de la bulle est très similaire dans les quatre cas. Sur le maillage le plus fin, les gradients de masse volumique sont représentés par des lignes noires plus fines que sur les autres. Les discontinuités présentes au niveau de l'interface et de l'onde de choc sont donc plus raides sur le maillage $R_0 800$. Au second instant, sur la figure 5.22(b), les ondes à l'intérieur et à l'extérieur de la bulle, ainsi que les instabilités sur l'interface sont mieux résolues sur le maillage le plus fin. De plus, la pointe observée sur la partie aval de la bulle n'apparaît pas nettement sur la simulation calculée avec le maillage $R_0 100$.

Les variations temporelles des positions des points amont x_{ui} et aval x_{di} de l'interface obtenues avec les maillages $R_0 100$, $R_0 200$, $R_0 400$ et $R_0 800$ sont représentées sur les figures 5.23(a) et 5.23(b). La position x_{ui} décroît de façon monotone et aucune différence notable n'est observée entre les quatre solutions. La position x_{di} , sur la figure 5.23(b), est constante jusqu'à $t = 200 \mu s$, puis décroît. Après $t = 200 \mu s$, les résultats obtenus pour les maillages $R_0 100$, $R_0 200$ et $R_0 400$ diffèrent mais ceux obtenus avec $R_0 400$ et $R_0 800$ sont très similaires. Ces écarts sont dus à la formation de la pointe sur l'axe de la bulle à $t = 200 \mu s$, qui est plus allongée sur les maillages fins que sur les maillages grossiers.

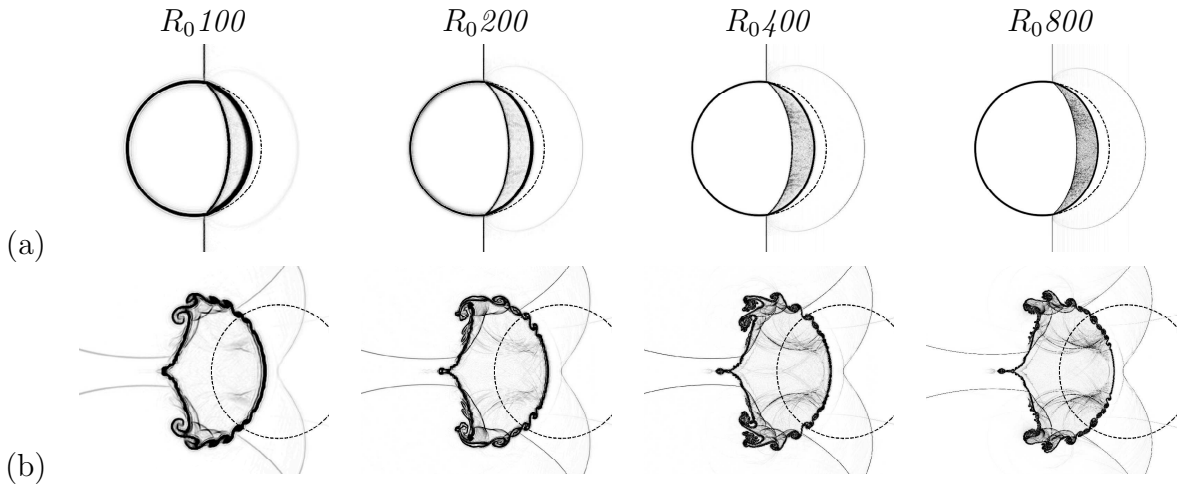


FIGURE 5.22 – Bulle de R22 : images Schlieren numériques obtenues à (a) $t = 55 \mu s$ et (b) $t = 417 \mu s$ à l'aide des maillages R_0100 (première colonne), R_0200 (seconde colonne), R_0400 (troisième colonne) et R_0800 (quatrième colonne).

Cependant, un nombre de 400 mailles dans le rayon initial de la bulle semble suffisant pour prédire correctement la longueur de la pointe.

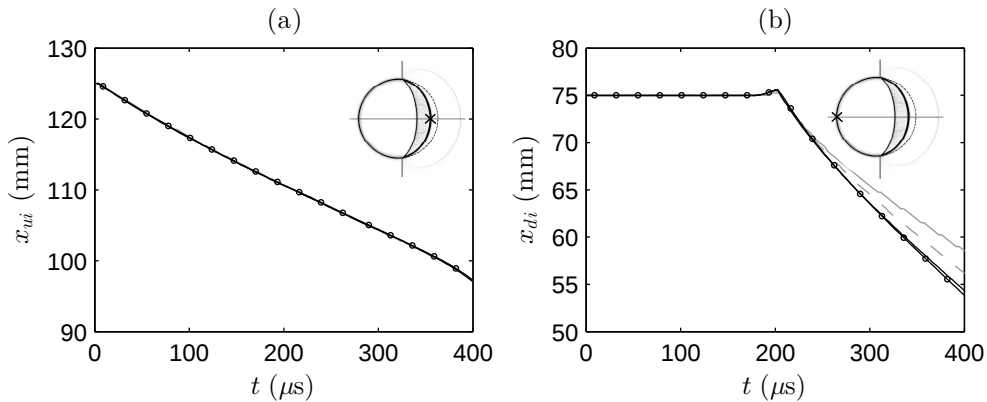


FIGURE 5.23 – Bulle de R22 : variations temporelles des positions des points (a) amont x_{ui} et (b) aval x_{di} de l'interface obtenues en utilisant — R_0100 , --- R_0200 , — R_0400 et —●— R_0800 . Ces positions sont indiquées par $\times$ dans le coin supérieur droit des figures.

Comme précédemment pour la bulle d'hélium, les fonctions de transfert des différentes dissipations sont représentées sur la figure 5.24. Elles sont estimées pour le maillage R_0100 sur la figure 5.24(a) et R_0800 sur la figure 5.24(b). La dissipation visqueuse apparaît supérieure à la dissipation numérique pour des structures discrétisées par plus de 6 points par longueur d'onde sur le maillage R_0100 et par plus de 5 points par longueur d'onde sur le maillage le plus fin. Ces nombres de points sont ensuite comparés au nombre de points dans

l'interface. Pour cela, l'évolution temporelle de l'épaisseur de l'interface mesurée au point x_{ui} sur les maillages R_0100 , R_0200 , R_0400 et R_0800 est représentée sur la figure 5.25(a). Le rapport entre cette épaisseur et la dimension d'une maille Δx est montré sur la figure 5.25(b). Quelque soit le maillage employé, l'interface est discrétisée par un minimum de 10 points. Les structures de l'écoulement sont donc suffisamment discrétisées pour être bien résolues.

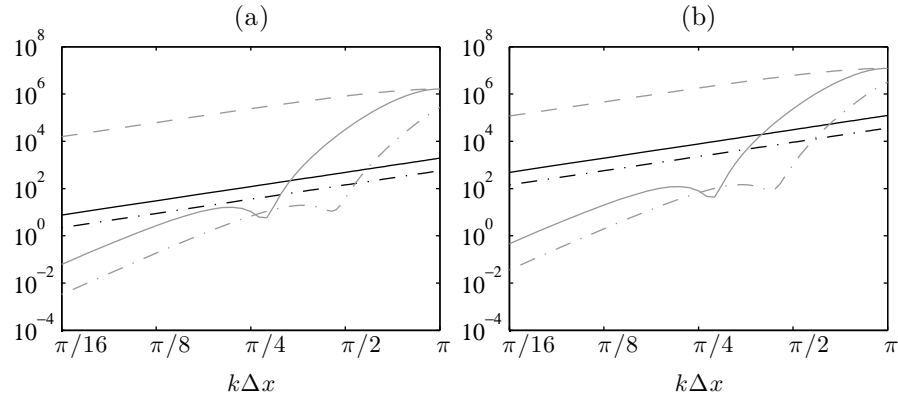


FIGURE 5.24 – Bulle de R22 : représentation des fonctions de transfert associées à . . . l'intégration temporelle, — au filtrage sélectif, - - - au filtrage des discontinuités et à la viscosité moléculaire — de l'air et . . . du R22 en fonction du nombre d'onde normalisé $k\Delta x$ [12], pour les maillages (a) R_0100 et (b) R_0800 .

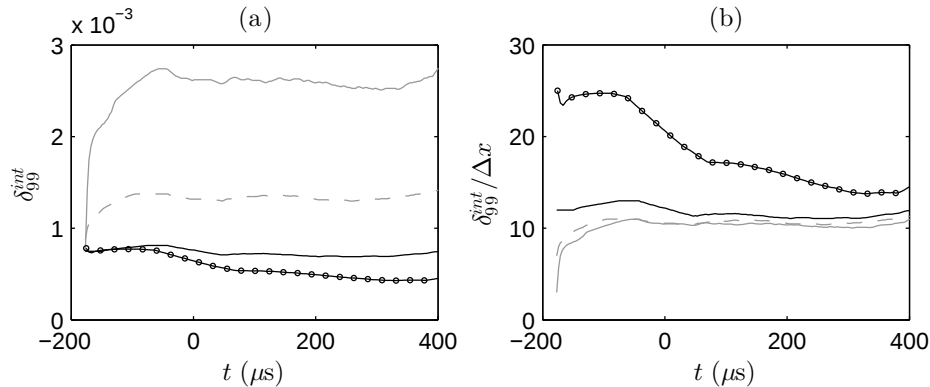


FIGURE 5.25 – Bulle de R22 : variations temporelles (a) de l'épaisseur de l'interface δ_{99}^{int} au point x_{ui} et (b) du rapport $\delta_{99}^{int}/\Delta x$ estimées pour les maillages — R_0100 , - - - R_0200 , — R_0400 et —●— R_0800 .

Les vitesses moyennes de l'onde de choc, de l'onde réfractée, de l'onde transmise et des faces amont et aval de l'interface sont données dans le tableau 5.4. Elles sont similaires aux résultats expérimentaux, également rassemblés dans le tableau. Ceci peut également être montré à l'aide du diagramme spatio-temporel de la figure 5.26, où les positions des différentes ondes de pression et des points amont x_{ui} et aval x_{di} de la bulle sont tracées en fonction du temps. L'ensemble de ces positions est mesuré le long de l'axe de symétrie de

la bulle. Elles sont comparées aux données expérimentales représentées par des cercles [33]. Après l'impact entre le choc, et la face amont de la bulle à $t = 0$, l'interface est advectée dans la direction aval et l'onde réfractée est créée. Cette dernière se propage dans la bulle de R22. Ensuite, l'onde réfractée frappe l'interface aval de la bulle à l'abscisse $x = 50$ mm et au temps $t = 194 \mu\text{s}$. Cette interface est alors advectée dans la direction aval et une onde de pression est transmise à l'extérieur de la bulle. Toutes les positions et vitesses des différentes ondes de pression et interfaces sont bien prédites pas la simulation.

	u_c (m.s ⁻¹)	u_r (m.s ⁻¹)	u_t (m.s ⁻¹)	u_{ui} (m.s ⁻¹)	u_{di} (m.s ⁻¹)
expérience	410 ± 41	240 ± 24	540 ± 54	73 ± 11	78 ± 8
simulation	417.8	251.9	529.6	74.4	80.1

TABLEAU 5.4 – Bulle de R22 : vitesses moyennes du choc incident u_c , de l'onde réfractée u_r , de l'onde transmise u_t , et des points amont et aval de l'interface u_{ui} et u_{di} , en m.s⁻¹.

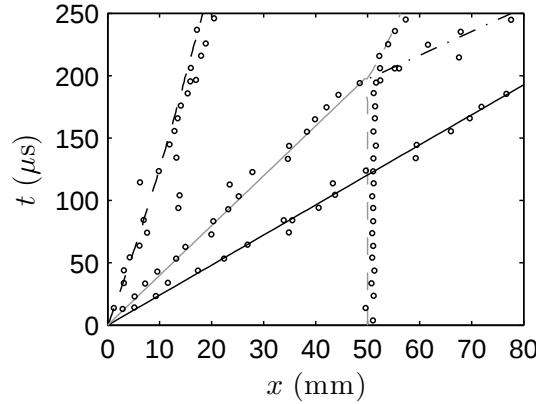


FIGURE 5.26 – Bulle de R22 : diagramme spatio-temporel indiquant les positions de — l'onde de choc incidente, — l'onde réfractée, -.- l'onde transmise, -.- l'interface amont en x_{ui} et -.- l'interface aval en x_{di} ; $\circ$ données expérimentales [33].

De la même manière que pour la bulle d'hélium, la masse de la bulle de R22 m_{R22} ainsi que l'erreur sur la masse Δm_{R22} sont calculées. Les variations temporelles de ces deux quantités estimées pour les maillages $R_0 100$, $R_0 200$, $R_0 400$ et $R_0 800$ sont présentées sur les figures 5.27(a) et 5.27(b). Pour $t \leq 0$, les variations de la masse de la bulle sont négligeables. Ensuite, lorsque le choc frappe l'interface, la masse augmente légèrement, puis elle décroît de façon monotone pour les trois maillages. L'erreur maximale calculée sur les deux maillages les plus fins est égale à 0.025 %. Malgré les importantes déformations de la bulle, les variations de la masse de R22 sont donc de faible amplitude.

Influence de la procédure de capture des discontinuités

Les simulations des bulles cylindriques d'hélium et de R22 ont été effectuées en utilisant la procédure de capture des discontinuités. Il s'agit ici de vérifier que cette procédure ne

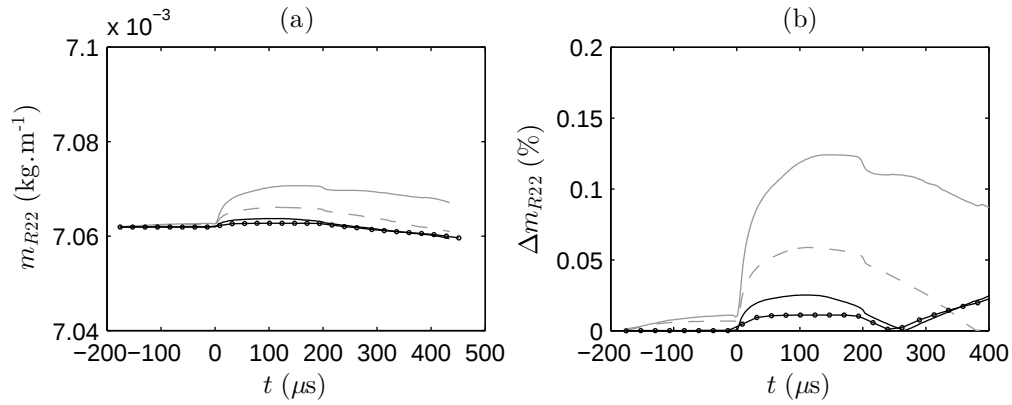


FIGURE 5.27 – Variations temporelles de (a) la masse de la bulle de R22 m_{R22} et de (b) l'erreur sur la masse Δm_{R22} ; solutions obtenues avec les maillages — R_0100 , --- R_0200 , — R_0400 et —●— R_0800 .

modifie pas la forme de l'interface comme ceci a été constaté lors de la simulation de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov.

Pour cela, une simulation de la bulle de R22 a été réalisée à l'aide du maillage R_0400 sans la procédure de capture des discontinuités. Les solutions de cette simulation à $t = 115, 187$ et $417 \mu s$ sont comparées aux résultats calculés avec la procédure de capture sur la figure 5.28. Les ondes de pression et l'interface sont moins dissipées lorsque le filtrage des discontinuités n'est pas employé. Cependant, la déformation de l'interface est similaire lorsque la simulation est réalisée avec ou sans la procédure de capture des discontinuités. Cette procédure ne déforme donc pas l'interface et permet de supprimer les oscillations parasites observées autour des forts gradients.

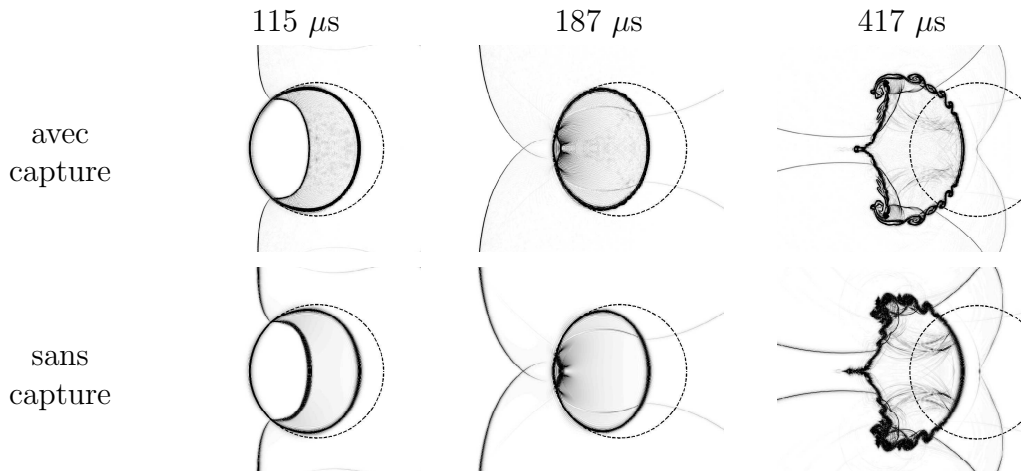


FIGURE 5.28 – Bulle de R22 : images Schlieren numériques obtenus à $t = 115 \mu s$, $t = 187 \mu s$ and $t = 417 \mu s$ avec le maillage R_0400 en utilisant la procédure de capture des discontinuités (première rangée) et sans l'utiliser (deuxième rangée).

6 Simulations d'implosions d'une bulle d'air dans l'eau

Ce dernier chapitre porte sur des simulations numériques d'implosions d'une bulle d'air dans l'eau incluant les effets compressibles, visqueux et conductifs. Cette étude est présentée sous la forme d'un article rédigé en anglais dont l'introduction est présentée dans sa première partie. La partie 2 du présent article est consacrée aux équations et méthodes numériques utilisées. Dans la partie 3, l'implosion sphérique d'une bulle d'air est étudiée. Cette implosion est provoquée par l'interaction d'une onde de choc convergente se propageant dans l'eau avec une bulle d'air. Dans la partie 4, une implosion non sphérique est simulée suite à l'impact d'une onde de choc plane avec une bulle d'air placée à proximité d'un mur. Enfin, les conclusions et perspectives de l'étude sont fournies dans la partie 5.

Simulations of bubble collapse including compressible, viscous and conductive effects

M. Capuano ^{a1}, C. Bogey ^a, P.D.M Spelt ^b

a. Univ Lyon, École Centrale de Lyon, Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique, UMR CNRS 5509, 69134 Écully Cedex, France.

b. Univ Lyon, Université Lyon 1, Département de Mécanique, 69622 Villeurbanne, France.

04/05/2018

Abstract

Numerical simulations of the collapse of an air bubble in water, including compressible, viscous and conductive effects are presented. They are performed by solving the compressible Navier-Stokes equations in conjunction with two advection equations that govern the evolution of the interface between the gas and the liquid. An additional equation is used in order to determine the temperature in both phases. These equations are solved using high-order explicit finite difference schemes providing small dispersion and dissipation errors. A discontinuity-capturing methodology based on spatial filtering is also implemented to avoid the apparition of numerical oscillations around discontinuities such as interface and shock waves. The numerical set-up is first validated by simulating the spherical collapse of an air bubble in water. The results compare well with the solutions obtained from a modified Rayleigh-Plesset equation. The effects of the thermal conductivity and initial interface thickness are investigated. Finally, results are presented for a bubble near a wall, hit by a plane shock wave propagating through water, assuming axisymmetry. The impact of the bubble collapse on the wall and the influence of the initial distance between the wall and the bubble are described.

Keywords

Finite differences, high-order, bubble collapse, viscosity, compressibility, conductivity, wall

1 Introduction

During a bubble collapse, very high values of temperature, pressure and velocity can be reached. They may cause material damage called cavitation erosion which has been observed, for instance, on underwater immersed propellers [13]. Understanding and controlling this erosion can be useful for material cleaning, lithotripsy or drug delivery [10]. Furthermore, a collapsing bubble may generate enough energy to emit light (sonoluminescence) or to initiate or accelerate chemical reactions (sonochemistry) [39].

Usually, during its collapse, a bubble cannot remain spherical because of the non-spherical feature of the system setup [9]. This is the case for a bubble near a boundary (stone, propeller, bubbles, ...) and for a free bubble impacted by a plane shock wave. The non-spherical collapse is mainly characterized by the formation of a liquid jet, also called

¹Corresponding author : marion.capuano@doctorant.ec-lyon.fr

re-entrant jet, crossing the bubble towards the wall, in the first configuration mentioned above, or in the direction of propagation of the shock wave impacting the free bubble, in the second one. Such a jet has been clearly observed on a free collapsing bubble in the experiments of Lauterborn and Bolle [21] and Ohl *et al.* [27, 28], and the influence of the initial distance between the bubble and a plane rigid boundary on the bubble deformation has been investigated by Lindau and Lauterborn [23] and by Shaw *et al.* [36]. However, because of the small size of the bubble (of the order of millimeters or micrometers) and the short time of the collapse (of a few microseconds), measuring the pressure, the temperature and the velocity inside and outside the bubble is very difficult.

Computations can be a useful tool to understand and describe non-spherical bubble collapses. However, developing robust and accurate numerical methods for the simulation of two-phase flows containing a deformable interface and involving high values of velocities, pressures and temperatures is not trivial. For instance, Nagrath *et al.* [26] used a ghost-fluid method including conductive and viscous effects to calculate a 3-D spherical collapsing bubble. Later, a ghost fluid method has also been used by Shaw and Spelt [37] to perform 1-D simulations of a spherical bubble collapse without conductivity and viscosity. Such a case is indeed often considered to validate the numerical methods, because results obtained from models predicting the temporal variations of the bubble radius such as the Rayleigh-Plesset model [31] are available. Simulations of non-spherical bubble collapse have mainly been carried out from the compressible Euler equations. In this way, Hawker and Ventikos [16] performed 2-D and 3-D non-viscous and non-conductive simulations providing detailed pictures of the various pressure waves encountered inside and outside a free bubble after its interaction with a plane shock wave. Johnsen and Colonius [17, 18] and Turangan *et al.* [43] conducted 2-D axisymmetric simulations of a spherical bubble located near a wall and hit by a plane shock wave. However, it has been observed by Popinet and Zaleski [30] using a *front-tracking* method and by Minsier *et al.* [24] using a *volume of fluid* method that viscosity modifies the re-entrant jet velocity. Furthermore, Chapman and Plesset [12] have shown that thermal conduction is significant during the collapse. This led Beig and Johnsen [5] to develop a method for the simulation of the implosion of a 3-D bubble near a plane wall including compressibility, viscosity and conductivity.

The objective of the present study is to simulate bubble collapse including compressible, viscous and conductive effects using high-order finite difference methods. The methods have previously allowed us to simulate multi-component flows such as the Richtmyer-Meshkov instability developing on an air-SF6 interface or the interactions of a plane shock wave propagating through air with a cylindrical bubble filled with helium or R22 [11]. Here, the accuracy of the numerical results is first quantified by comparing them with the solutions obtained from a modified Rayleigh-Plesset equation in the case of a spherical collapse. Then, a plane shock wave travelling in water and impacting a spherical air bubble located near a wall is simulated using a 2-D axisymmetric configuration.

The present paper is organized as follows. The governing equations and the numerical methods are given in Section 2. The simulations of the spherical collapse of an air bubble in water are presented in Section 3. In Section 4, axisymmetric simulations of the near-wall bubble collapse are shown. Concluding remarks and perspectives are finally provided in Section 5.

2 Governing equations and numerical methodology

2.1 Governing equations

We consider immiscible two-phase flows, but do not assume an interfacial region consisting of a mixture of tiny droplets or bubbles (which would necessitate a continuum model of a dispersed two-phase flow). The interface would therefore be expected to be sharp, but the model that is proposed here does assume an interface region wherein field variables smoothly vary between bulk values. In the following, we shall first develop the governing equations when assuming a sharp interface, and present the justification of the non-sharp model at the end of this subsection.

For sharp interfaces, we denote the color function $\phi_\alpha(x, t)$ of fluid α ; note that at the end of this section this definition is modified. We shall pursue a single-fluid formulation, such that the local density and internal energy per unit volume are, respectively,

$$\rho = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \rho_{\alpha} \quad \text{and} \quad \rho e = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \rho_{\alpha} e_{\alpha}, \quad (1)$$

Taking the traction and the heat flux to be continuous at the interface between the two fluids, neglecting surface tension and assuming neither mass transfer nor phase change, the governing equations for the two-phase flow can be written, in conservative form, as

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial u_i E}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i \sigma_{ij}) - \frac{\partial q_i}{\partial x_i}, \end{cases} \quad (2)$$

where u_i is the velocity component in the i -direction and $E = \rho |\mathbf{u}|^2/2 + \rho e$ is the total energy per unit volume V [11]. The expression for the stress tensor σ_{ij} for a Newtonian flow is

$$\sigma_{ij} = - \left(p - \mu_b \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad (3)$$

where $p = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} p_{\alpha}$ is the thermodynamic pressure and

$$\mu = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \mu_{\alpha} \quad \text{and} \quad \mu_b = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \mu_{b\alpha} \quad (4)$$

are the shear viscosity and the bulk viscosity of the flow [11]. Note that the index α denotes a quantity associated with phase α . The heat flux is assumed to be

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (5)$$

where T is the temperature and

$$\lambda = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \lambda_{\alpha} \quad (6)$$

is the thermal conductivity of the two-phase flow. The empirical relations used to estimate μ_α , μ_{b_α} and λ_α for air and water are given in Appendix A.

The thermodynamic pressure p_α of a liquid or a gas α is obtained using the stiffened equation of state [2, 19, 29]. It can be expressed as

$$p_\alpha = (\gamma_\alpha - 1)\rho_\alpha e_\alpha - \gamma_\alpha B_\alpha, \quad (7)$$

where γ_α and B_α are characteristic constants of phase α . For $B_\alpha = 0$, the stiffened equation of state reduces to that for a perfect gas with $\gamma_\alpha = c_{p,\alpha}/c_{v,\alpha}$ where $c_{p,\alpha}$ and $c_{v,\alpha}$ are the heat capacities at constant pressure and constant volume. For water, various values for γ_α and B_α are encountered in the literature [14, 18, 33]. Some of them do not result in a correct estimate of the speed of sound c_α which is defined by $c_\alpha = \sqrt{\gamma_\alpha(p_\alpha + B_\alpha)/\rho_\alpha}$. Coralic and Colonius [14] suggested to use $\gamma_{H_2O} = 6.12$ and $B_{H_2O} = 3.43 \times 10^8$ Pa in order to obtain a speed of sound in water approximately equal to $c_{H_2O} = 1450$ m.s⁻¹ at standard conditions.

The stiffened equation of state for the two-phase flow can be derived starting from

$$\sum_\alpha \phi_\alpha \rho_\alpha e_\alpha = \sum_\alpha \frac{\phi_\alpha p_\alpha}{(\gamma_\alpha - 1)} + \sum_\alpha \frac{\phi_\alpha \gamma_\alpha B_\alpha}{(\gamma_\alpha - 1)}. \quad (8)$$

By substituting the definition for the energy (1) and assuming that pressure is uniform, $p = p_\alpha$, equation (7) can be written as

$$\rho e = \frac{p + \gamma B}{(\gamma - 1)}, \quad (9)$$

with

$$\frac{1}{(\gamma - 1)} = \sum_\alpha \frac{\phi_\alpha}{(\gamma_\alpha - 1)} \quad \text{and} \quad \frac{\gamma B}{(\gamma - 1)} = \sum_\alpha \phi_\alpha \frac{\gamma_\alpha B_\alpha}{(\gamma_\alpha - 1)}. \quad (10)$$

It remains to determine the interface location. This can be obtained from an advection-type equation for a scalar function $\chi(\mathbf{x}, t)$ in a non-conservative form

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \chi = 0, \quad (11)$$

or in a conservative form,

$$\frac{\partial \rho \chi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \rho \chi) = 0. \quad (12)$$

One possible choice for the scalar χ is the mass fraction of one of the two phases [34], for which both transport equations above are exact. However, the volume fraction is still unknown and is required for the computation of the flow properties (see equations (4) and (6)), and of the quantities $1/(\gamma - 1)$ and $\gamma B/(\gamma - 1)$. Furthermore, the advection of the mass fraction was found to generate numerical oscillations at an interface between two fluids at constant velocity, pressure and temperature [1, 11].

In the present study, the method proposed by Shyue [38] is used. This consists in solving

two non-conservative advection equations, namely [17, 38]

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\gamma-1} \right) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\gamma-1} \right) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\gamma B}{\gamma-1} \right) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\gamma B}{\gamma-1} \right) = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Thus, from the values of $1/(\gamma-1)$ and $\gamma B/(\gamma-1)$, the volume fraction is directly obtained through equations (10) and pressure is estimated using the stiffened equation of state (9) written as

$$p = \frac{1}{1/(\gamma-1)} \left(E - \frac{1}{2} \rho u^2 - \frac{\gamma B}{(\gamma-1)} \right).$$

Finally, the temperature is computed by solving an equation obtained from the internal energy equation and from thermodynamic relations [3]. This allows us to estimate the temperature in both phases whilst taking account of compressible, viscous and conductive effects. This equation is written in quasi-conservative form as [3]:

$$c_p \left[\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) \right] = \beta T \frac{Dp}{Dt} + 2\mu \epsilon_{ij} \epsilon_{ij} + \left(\mu_v - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 - \nabla \cdot \mathbf{q}, \quad (14)$$

where the operator D/Dt is the material derivative, $\epsilon_{ij} = 1/2 (\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u})$ is the strain tensor and β is the thermal expansion coefficient such that $\beta = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \beta_{\alpha}$. The relations used for the computation of β_{α} for air and water are given in Appendix A. The first term on the right-hand side of equation (14) corresponds to temperature change due to thermal expansion, related to the pressure variations. The next two terms represent viscous heating. The last term is the heat flux. The heat capacity at constant pressure of the two-phase flow c_p is determined using the additional equation [5]

$$\frac{\partial \rho c_p}{\partial t} + \frac{\partial \rho c_p u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (15)$$

Thus far, we have considered a sharp formulation wherein a color function is a generalized function. Throughout this work, however, we do allow for the existence of an interfacial layer wherein field variables vary smoothly between the bulk values. Although this is often introduced as a numerical necessity, the interpretation in physical terms of the introduction of what will be referred to as a volume fraction of each phase would call for a justification in real terms, which is undertaken in the following.

Consider a large number of realizations of an immiscible two-phase flow, wherein realizations differ only slightly through the initial interface location; such uncertainty occurs in experiments also. In each realization, the sharp-interface model presented in the above applies. We now aim to formulate the governing equations for the ensemble-averaged field variables. The average of the relation (1) for the density can be written in the same form, if the volume fraction is interpreted as the probability of being in fluid α , and ρ_{α} as the (conditional) average density of fluid α under the condition that one is in fluid α . Likewise, the accompanying expression (1) for the internal energy per unit volume is then the averaged internal energy per unit mass; thus e is defined as the averaged internal energy per unit volume divided by the averaged density, it is not the direct average of the internal energy

per unit mass.

The ensemble-averaged balance equations take the same form as (2). This is because ensemble averaging is a linear operation and therefore commutes with differentiation; products of discontinuous functions such as density with velocity do not introduce new terms, since the velocity is continuous at interfaces and therefore do not differ significantly between realizations of the flow.

The averaged counterparts of the rest of the sharp-interface model presented above, equations (3)-(6), (8)-(15), likewise results in the same model for the corresponding averaged field variables. Equation (8) may seem to contain non-linearities, but – as e in (1) – the ‘averaged’ values of γ and B are defined through (13). Thus, for example, formally the right-hand side of (13b) is the average of $\gamma B/(\gamma - 1)$; the ‘averaged’ value of B is then defined as this average times $(\gamma - 1)/\gamma$, where the ‘averaged’ γ is defined in a similar manner.

Finally, we note that the averaged transport equation for the color function itself (the average of (11) for the choice $\chi = \phi_\alpha$) would simply be a transport equation for the probability of being in fluid α .

In conclusion, the model presented above will be used throughout this work, but allowing for a smooth variation across interfaces of otherwise discontinuous field variables, the physical interpretation of the smoothed variables being these represent ensemble averaged fields, averaged over realizations of the flow wherein interfaces are located at slightly different positions. For convenience, given the common notation in prior work, we shall loosely refer to ϕ_α as the volume fraction of phase α , instead of the probability of the observation point being in fluid α .

2.2 Numerical methods

The equations presented in the previous section are solved using high-order explicit finite-difference schemes. These schemes have been originally designed to provide low dissipation and dispersion errors for aeroacoustic computations [7, 8], and have been adapted to the simulation of multi-component gas-gas flows [11]. The present computational approach has been previously validated by simulating viscous and conductive gas-gas flows such as the Richtmyer-Meshkov instability flow developing on an air-SF6 interface or the interactions between a plane shock wave propagating through air and a cylindrical bubble filled with helium or R22 [11].

The spatial derivatives are estimated using an eleven-point fourth-order centered finite difference scheme [7]. Thus, the derivative at point x_0 , in the i -direction of the density ρ for instance, is approximated by

$$\frac{\partial \rho}{\partial x_i}(x_0) = \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=-5}^5 a_j \rho(x_0 + j\Delta x) , \quad (16)$$

where Δx is the grid spacing for a uniform mesh. The scheme coefficients are such that $a_j = -a_{-j}$, providing no dissipation [7]. For the temporal advancement, an explicit second-order six-step Runge-Kutta algorithm is implemented [7]. It has been designed in order to minimize the numerical dissipation and dispersion errors over a wide range of frequencies.

At the end of each time step, a conservative sixth-order filtering is applied to the variables ρ , $\rho \mathbf{u}$, E , $1/(\gamma - 1)$ and $\gamma B/(\gamma - 1)$ in order to remove grid-to-grid oscillations [7, 11], yielding

at node i

$$\rho_i^{sf} = \rho_i - \sigma^{sf} D_i^{sf} \quad \text{with} \quad D_i^{sf} = \sum_{j=-5}^5 d_j \rho_{i+j},$$

for instance for density. The filtering procedure is conservative since the filtering intensity σ^{sf} is constant [20]. Here, it is equal to $\sigma^{sf} = 1$ in order to completely remove the grid-to-grid oscillations after each filtering application. The coefficients d_j are such that $d_j = d_{-j}$, providing no dispersion [7]. They have been chosen not to significantly affect the waves discretized by more than four mesh points per wavelength [7].

An additional, conservative filtering method is employed to capture discontinuities such as shock waves and interfaces [8, 11]. It is based on the use of two discontinuity sensors and on the application of a second-order spatial filter at each time step to the variables ρ , $\rho \mathbf{u}$, E , $1/(\gamma - 1)$ and $\gamma B/(\gamma - 1)$ in order to damp Gibbs oscillations that may appear around discontinuities. The magnitude of this filter σ^{df} is adjusted dynamically from the flow variables in order to be negligible in the absence of oscillations, yielding at node i , for density :

$$\rho_i^{df} = \rho_i - \left(\sigma_{i+\frac{1}{2}}^{df} D_{i+\frac{1}{2}}^{df} - \sigma_{i-\frac{1}{2}}^{df} D_{i-\frac{1}{2}}^{df} \right),$$

$$\text{with } D_{i+\frac{1}{2}}^{df} = \sum_{j=-1}^2 c_j \rho_{i+j} \quad \text{and} \quad D_{i-\frac{1}{2}}^{df} = \sum_{j=-1}^2 c_j \rho_{i+j-1},$$

where $c_1 = -c_0 = -1/4$ and $c_2 = -c_{-1} = 0$. In order to obtain a conservative formulation for the filtering, the intensity σ^{df} between nodes is defined [8] by

$$\sigma_{i+\frac{1}{2}}^{df} = \frac{1}{2} \left(\sigma_{i+1}^{df} + \sigma_i^{df} \right) \quad \text{and} \quad \sigma_{i-\frac{1}{2}}^{df} = \frac{1}{2} \left(\sigma_i^{df} + \sigma_{i-1}^{df} \right).$$

Finally, in order to advance the temperature equation (14) in time using the explicit Runge-Kutta algorithm [7], the temporal derivative of the pressure $\partial p / \partial t$ is computed from a standard third-order backward finite-difference scheme, giving at the n th time iteration

$$\left. \frac{\partial p}{\partial t} \right|_n = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{11}{6} p_n - 3 p_{n-\Delta t} + \frac{3}{2} p_{n-2\Delta t} - \frac{1}{3} p_{n-3\Delta t} \right), \quad (17)$$

where Δt is the time step, and p_n , $p_{n-\Delta t}$, $p_{n-2\Delta t}$ and $p_{n-3\Delta t}$ are the values of pressure at times t , $t - \Delta t$, $t - 2\Delta t$ and $t - 3\Delta t$, respectively.

3 One-dimensional simulations of a spherical bubble collapse

3.1 Initial conditions

In the present section, the spherical collapse of an air bubble hit by a spherically converging shock wave propagating through water is simulated in order to validate the governing equations and the numerical methods presented previously. First, the numerical results are compared with the solutions obtained from a modified Rayleigh-Plesset equation. This is followed by a study of the influence of the spatial selective filter, the initial interface thick-

ness and the thermal conductivity. The present flow is simulated by solving the equations presented in Section 2, in 1-D using spherical coordinates, as detailed in Appendix B.

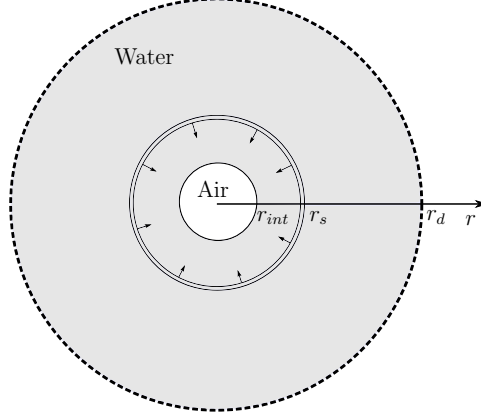


Figure 1: The initial conditions used for the spherical collapse of an air bubble in water; --- boundary of the domain, == converging shock wave.

A representation of the initial conditions is provided in Figure 1. The air (in white) is surrounded by water (in grey). Initially, the center of the bubble is at $r = 0$ and its radius is set to $R_0 = 10 \mu\text{m}$. Thus, the air-water interface is located at $r = r_{int} = R_0$. The converging shock wave is initially located at $r = r_s = 1.5R_0$. Radiation conditions [41] are imposed at the boundary of the domain at $r_d = 25R_0$. Initially, the bubble and the water downstream of the shock wave are at standard pressure $p_0 = 10^5 \text{ Pa}$, and the temperature $T_0 = 293 \text{ K}$ is uniform through the entire domain. The initial conditions for density, radial velocity, pressure, and parameters γ and B are given by:

$$(\rho, u_r, p, \gamma, B) = \begin{cases} (1.1892 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 10^5 \text{ Pa}, 1.4, 0) & \text{for } r \leq r_{int} \\ (1000 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 10^5 \text{ Pa}, 6.12, 3430 \times 10^5 \text{ Pa}) & \text{for } r_{int} < r \leq r_s \\ (1000 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 10^6 \text{ Pa}, 6.12, 3430 \times 10^5 \text{ Pa}) & \text{for } r > r_s \end{cases}$$

3.2 Numerical parameters

The simulations are performed using three meshes containing 800, 1600 and 3200 cells in the initial bubble radius R_0 , denoted by R_{0800} , R_{01600} and R_{03200} , respectively. The total number of grid cells n_r and the size of the mesh cells Δr are given in Table 1. For the three grids, the sizes of the mesh cells are uniform and $\Delta r = \Delta z$ for $0 < r \leq 25R_0$. In order to damp the pressure waves exiting the computational domain, the mesh cells are stretched until $r = 100R_0$. The number of mesh cells in the r and z directions, and the time step Δt used for the three grids are given in Table 3. In order to treat the singularity of the spherical equations at the origin, the method developed by Mohseni and Colonius [25] is employed. It consists in placing the first mesh point at $r = \Delta r/2$ and computing spatial derivatives using mesh points located at both sides of the singularity.

In order to impose exactly the same initial conditions using the three meshes, a hyperbolic tangent profile [11, 42] is used to model the interface. The initial thickness of the interface δ_{99}^{int} is defined as the distance between the positions where the volume fraction is

equal to 0.01 and 0.99. Thus, the volume fractions of water ϕ_{H_2O} and air ϕ_{air} are initially set to

$$\begin{cases} \phi_{H_2O} = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{r - R_0}{\delta_{th}} \right) \right] , \\ \phi_{air} = 1 - \phi_{H_2O} , \end{cases} \quad (18)$$

where δ_{th} is given by

$$\delta_{th} = \delta_{99}^{int} / \left(-2 \tanh^{-1} \left(\frac{0.01 - 0.5}{0.5} \right) \right) .$$

The initial interface thickness is arbitrarily chosen as $\delta_{99}^{int} = 0.1 \mu\text{m}$. Therefore, it is discretized by $8\Delta r$, $16\Delta r$ and $32\Delta r$ using the meshes $R_0 800$, $R_0 1600$ and $R_0 3200$, respectively. Its influence on the solutions will be studied in Section 3.3.3.

The simulations are carried out using a time step Δt which is empirically determined in order to obtain the highest time step preserving numerical stability. The time steps used for the three meshes are given in Table 1. The CFL numbers based on the initial speed of sound in water $c = 1451 \text{ m.s}^{-1}$ are equal to 0.1, 0.07 and 0.03 using $R_0 800$, $R_0 1600$ and $R_0 3200$, respectively. These numbers are very low indicating that the stability is most probably imposed by the Fourier number $Fo = \nu \Delta t / \Delta r^2 \simeq 0.1$ based on the shear viscosity $\nu = 1.67 \times 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ of air. It will be shown in the next section that the maximum velocity of the bubble interface is equal to $u_{max} = 62 \text{ m.s}^{-1}$ for a bubble radius $R = 0.03R_0$ providing a Reynolds number approximately equal to $Re = u_{max}R/\nu = 18.6$ in water. This very low value supports the suggestion that the time step is limited by the stability of the integration of the viscous fluxes.

	n_r	Δr (m)	Δt (s)
$R_0 800$	20000	1.25×10^{-8}	8.615×10^{-13}
$R_0 1600$	40000	6.25×10^{-9}	3.015×10^{-13}
$R_0 3200$	80000	3.125×10^{-9}	6.461×10^{-14}

Table 1: Number of grid cells n_r , size of the mesh cells Δr and time step Δt used for the meshes $R_0 800$, $R_0 1600$ and $R_0 3200$.

3.3 Results

3.3.1 Influence of the selective filtering

As reported in the previous section, the time steps in the simulations are very small due to the viscous effects. Because the selective filter is applied every iteration, this can lead to excessive dissipation. In order to show the influence of the selective filter on the solutions, three simulations are performed using the mesh $R_0 800$, by applying the filter at each iteration, every tenth iteration and every twentieth iteration, respectively.

The temporal variations of the bubble radius are presented in Figure 2. The time $t = 0$ corresponds to the instant just after the shock-interface interaction, when the bubble radius starts to change. From $t = 0$ to $0.315 \mu\text{s}$, the bubble radius decreases. The bubble shrinks because the pressure imposed by the shock wave is higher than the pressure inside the bubble. At $t = 0.315 \mu\text{s}$, the bubble radius reaches a minimum value equal to $R = 0.34R_0$ after

which, it grows. The minimum bubble radius obtained by applying the selective filtering every iteration is larger than those provided by the two other simulations. Therefore, the dissipation introduced by the filtering significantly affects the bubble deformation when the filter is applied at each time step. On the contrary, the differences between the results computed using the selective filter every tenth and twentieth iteration are negligible. Similar observations are made from the temporal variations of the pressure at the bubble center p_c in Figure 3. Applying the filter every time step provides a lower pressure at $t = 0.315 \mu s$ than in the two other cases. In Figure 3(b) the solutions show significant oscillations when the selective filter is applied every twentieth iteration. Consequently, applying the selective filter every tenth time step removes grid-to-grid oscillations whilst avoiding unnecessary excessive dissipation. Note that, the influence of the selective filtering on the solutions has also been investigated using the two other meshes. Similar observations have been observed between the three meshes (not shown here). Thus, in the following simulations the selective filter will be applied every tenth iteration.

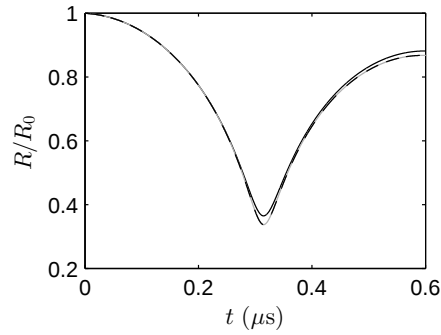


Figure 2: Temporal variations of the bubble radius R normalized by R_0 , obtained with $R_0 800$ by applying the selective filter — every iteration, --- every tenth iteration and — every twentieth iteration.

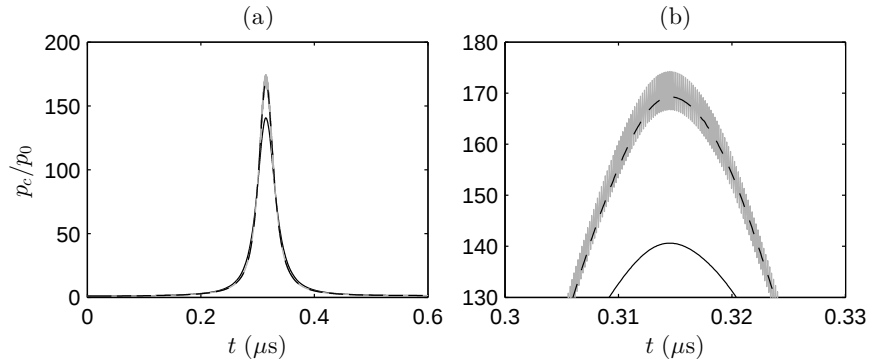


Figure 3: Temporal variations of the pressure at the bubble center p_c normalized by p_0 (a) from $t = 0$ to $0.6 \mu s$ and (b) from $t = 0.3$ to $0.33 \mu s$, obtained with $R_0 800$ by applying the selective filter — every iteration, --- every tenth iteration and — every twentieth iteration.

3.3.2 Validation against the Rayleigh-Plesset model

After the interaction between the bubble and the incoming shock wave, the bubble successively shrinks and grows until it reaches an equilibrium state. This phenomenon can be predicted by the Rayleigh-Plesset equation [31], providing the temporal variations of the radius $\dot{R}$ of a spherically collapsing bubble surrounded by an incompressible liquid. In the present study, a modified Rayleigh-Plesset equation taking account of the water viscosity and compressibility is used. It has been developed by Shaw [35] using an energy approach as in Doinikov [15]. In that model, it is assumed that the air is an ideal gas and that the bubble oscillates adiabatically. Thus, the pressure inside the bubble p_b is related to the initial bubble pressure p_{b_0} by $p_b = p_{b_0}(R_0/R)^{3\gamma_{air}}$. Neglecting the surface tension and assuming that the interface is sharp, the bubble radius $R(t)$ is obtained from the modified Rayleigh-Plesset equation

$$R\ddot{R}\left(1 - \frac{2\dot{R}}{c} + \frac{4\mu}{\rho R c}\right) + \frac{3\dot{R}^2}{2}\left(1 - \frac{4\dot{R}}{3c}\right) = \frac{p_{b_0}}{\rho}\left(\frac{R_0}{R}\right)^{3\gamma_{air}}\left(1 - 3\gamma_{air}\frac{\dot{R}}{c}\right) - \frac{p_a}{\rho} - \frac{4\mu\dot{R}}{\rho R}\left(1 - \frac{\dot{R}}{c}\right), \quad (19)$$

where $\dot{R}$ and $\ddot{R}$ are the first and second temporal derivatives of the bubble radius. The parameters $\rho = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$, $\mu = 1.002 \times 10^{-3} \text{ Pa.s}$ and $c = 1451 \text{ m.s}^{-1}$ are the density, the viscosity and the speed of sound in water. The heat capacity ratio of the air γ_{air} is equal to 1.4.

The temporal variation of the bubble radius R obtained using the three meshes for an initial interface thickness equal to $\delta_{99}^{int} = 0.01R_0 = 0.1 \text{ }\mu\text{m}$ is presented in Figure 4. The results are compared with the solution of the modified Rayleigh-Plesset equation (19). An initial value for $\dot{R}$ is needed to solve equation (19). It is estimated by fitting the numerical solution at $t = 0$. From $t = 0$ to $0.26 \text{ }\mu\text{s}$, all the solutions are in very good agreement. At $t = 0.315 \text{ }\mu\text{s}$, the solution computed on the coarsest grid is significantly different from the other two. The minimum radius of the bubble is equal to $R = 0.34R_0$ using R_0800 and to $R = 0.295R_0$ using R_01600 and R_03200 . Furthermore, from $t = 0$ to $0.41 \text{ }\mu\text{s}$, a very good agreement is observed between the results obtained using R_01600 and R_03200 and the solution computed from equation (19). Therefore, the grid R_01600 enables the minimum bubble radius to be correctly predicted. After $t = 0.46 \text{ }\mu\text{s}$, the simulations all provide a smaller radius than the Rayleigh-Plesset equation. This may be due to the initial interface thickness or to the thermal conductivity which are not taken into account in the Rayleigh-Plesset model. This issue will be investigated in the next two sections.

The temporal variations of the pressure p_c and the temperature T_c at the bubble center obtained using the three meshes are presented in Figure 5. When the bubble reaches its minimum volume, the pressure strongly differs according to the mesh. Significant discrepancies are observed between the solutions computed on the coarsest mesh and the two others, whereas, the results obtained using R_01600 and R_03200 are very similar. Consequently, it appears that the simulation performed using R_01600 does not depend appreciably on the grid.

When the bubble collapses, the pressure at the bubble center is 200 times higher than its initial value of $p_0 = 10^5 \text{ Pa}$, and the temperature reaches a value of 1350 K .

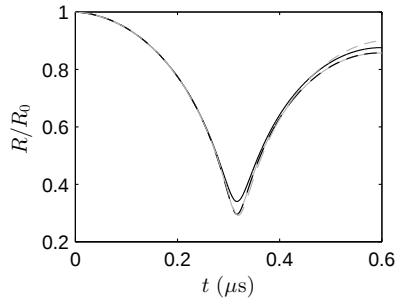


Figure 4: Temporal variations of the bubble radius normalized by the initial radius R_0 obtained using the meshes — $R_0 800$, — $R_0 1600$ and --- $R_0 3200$; --- solution from the modified Rayleigh-Plesset equation (19).

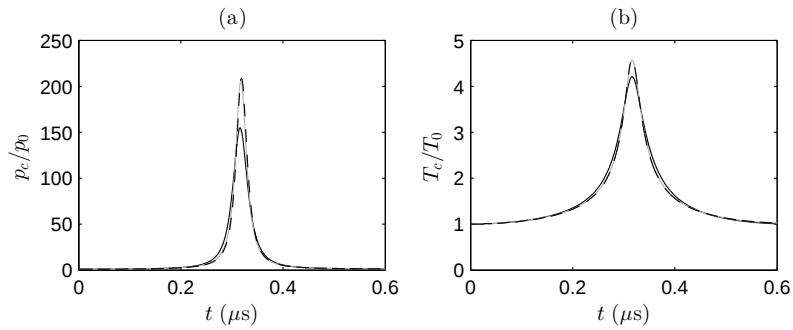


Figure 5: Temporal variations of (a) the pressure at the bubble center p_c normalized by p_0 and (b) the temperature at the bubble center T_c normalized by T_0 , obtained using — $R_0 800$, — $R_0 1600$ and --- $R_0 3200$.

Finally, the temporal variations of the velocity $\dot{R}$ and the acceleration $\ddot{R}$ of the bubble interface are represented in Figures 6(a) and 6(b). From $t = 0$ to $0.29 \mu\text{s}$, the velocity of the interface decreases reaching a minimum of $\dot{R} = -62 \text{ m.s}^{-1}$ whereafter it rapidly increases. At $t = 0.315 \mu\text{s}$, the interface velocity is null and the acceleration is maximum with $\ddot{R} = 6.12 \times 10^9 \text{ m.s}^{-2}$. Subsequently, the velocity reaches a maximum of $\dot{R} = 53.77 \text{ m.s}^{-1}$ at $t = 0.0338 \mu\text{s}$. Finally it slowly decreases until $t = 0.6 \mu\text{s}$. The velocity and acceleration of the interface are both very similar to the solutions obtained from the Rayleigh-Plesset equation (19).

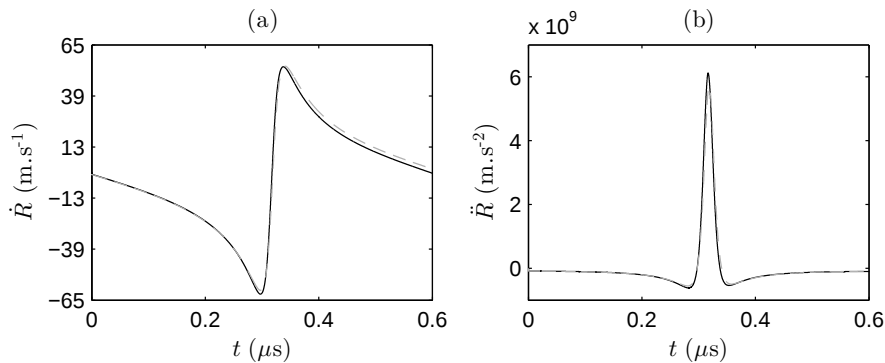


Figure 6: Temporal variations of (a) the velocity $\dot{R}$ of the bubble interface and (b) the acceleration $\ddot{R}$ of the bubble interface obtained using $R_0 1600$; --- solution from the Rayleigh-Plesset equation (19).

3.3.3 Influence of the initial thickness of the interface

The influence of the initial thickness of the interface is investigated by considering different thicknesses of $\delta_{99}^{int} = 8\Delta r$, $16\Delta r$ and $32\Delta r$ on the three grids. The values of these interface thicknesses normalized by R_0 are given in Table 2.

δ_{99}^{int}	$8\Delta r$	$16\Delta r$	$32\Delta r$
$R_0 800$	$0.01R_0$	$0.02R_0$	$0.04R_0$
$R_0 1600$	$5 \times 10^{-3}R_0$	$0.01R_0$	$0.02R_0$
$R_0 3200$	$2.5 \times 10^{-3}R_0$	$5 \times 10^{-3}R_0$	$0.01R_0$

Table 2: Initial interface thickness used for the meshes $R_0 800$, $R_0 1600$ and $R_0 3200$.

The time signal of the pressure at the bubble center is presented in Figure 7. Using the three grids, the influence of the thickness interface on the pressure is only noted at $t = 0.315 \mu\text{s}$. Using $R_0 800$ and $R_0 1600$ in Figures 7(a-b), the maximum peak of pressure is obtained for an initial interface thickness equal to $16\Delta r$. Using the finest mesh $R_0 3200$, the maximum pressure at the bubble center is observed in the solutions computed for $\delta_{99}^{int} = 16\Delta r$ and $32\Delta r$. Furthermore, for the three meshes, the thinner interface $\delta_{99}^{int} = 8\Delta r$ provides the lowest pressure values. This indicates that the solutions are numerically damped because of insufficient discretization of the interface.

Similar observations can be made in the temporal variations of the temperature T_c at the bubble center in Figure 8. Using the three grids, the highest values of temperature are obtained for $\delta_{99}^{int} = 16\Delta r$ and the lowest values are observed for $\delta_{99}^{int} = 8\Delta r$. However, the temperature is almost insensitive to the initial interface thickness.

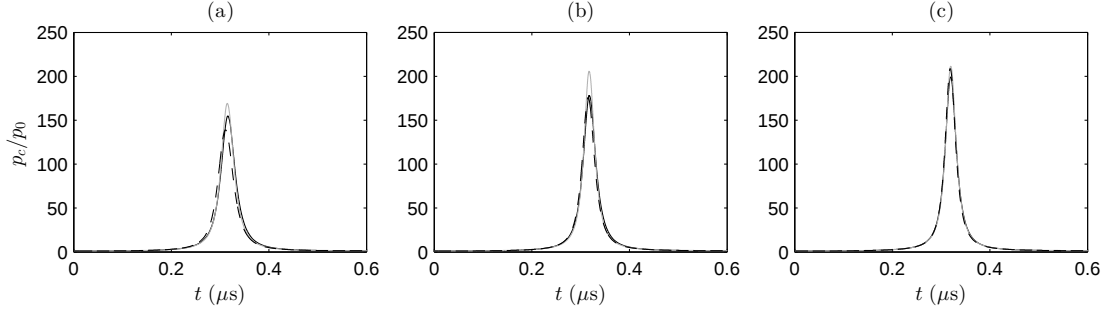


Figure 7: Temporal variations of the pressure at the bubble center p_c normalized by p_0 , obtained using the meshes (a) $R_0 800$, (b) $R_0 1600$ and (c) $R_0 3200$ for three initial interface thickness: — $\delta_{99}^{int} = 8\Delta r$, — $\delta_{99}^{int} = 16\Delta r$ and --- $\delta_{99}^{int} = 32\Delta r$.

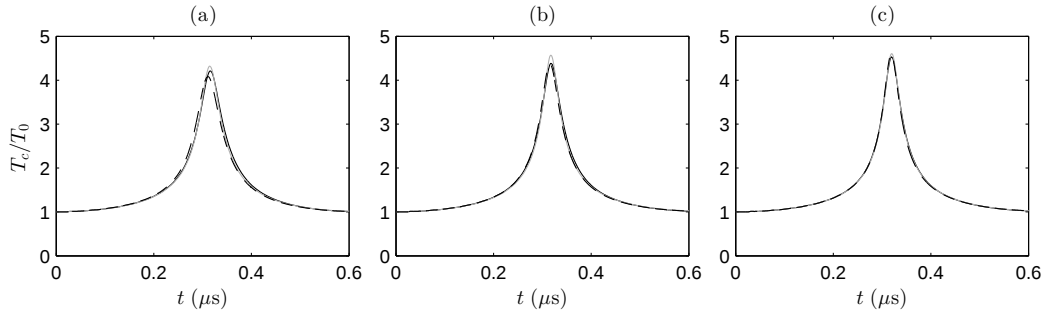


Figure 8: Temporal variations of the temperature at the bubble center T_c normalized by T_0 , obtained using the meshes (a) $R_0 800$, (b) $R_0 1600$ and (c) $R_0 3200$ for the initial interface thickness — $\delta_{99}^{int} = 8\Delta r$, — $\delta_{99}^{int} = 16\Delta r$ and --- $\delta_{99}^{int} = 32\Delta r$.

The temporal variations of the bubble radius obtained for the three initial interface thicknesses are presented in Figure 9. Using the coarsest mesh $R_0 800$ in Figure 9(a), significant differences are observed between the solutions computed for $\delta_{99}^{int} = 8\Delta r$ and for the two other cases, whereas the results obtained with $\delta_{99}^{int} = 16\Delta r$ and $\delta_{99}^{int} = 32\Delta r$ are very similar. In addition, for the three initial interface thicknesses, use of the mesh $R_0 800$ does not result in the minimum bubble radius that is predicted by the Rayleigh-Plesset model. For $R_0 1600$, in Figure 9(b), slightly different solutions are obtained depending on the initial interface thickness. The solution computed from the Rayleigh-Plesset equation best agree with the solution for $\delta_{99}^{int} = 16\Delta r$. Finally, in Figure 9(c), very small differences are found between the results estimated using the finest mesh $R_0 3200$. Once again, the best agreement between the Rayleigh-Plesset solution and the numerical simulations is noted for $\delta_{99}^{int} = 16\Delta r$. The minimum bubble radius is slightly lower than the one predicted by the Rayleigh-Plesset model.

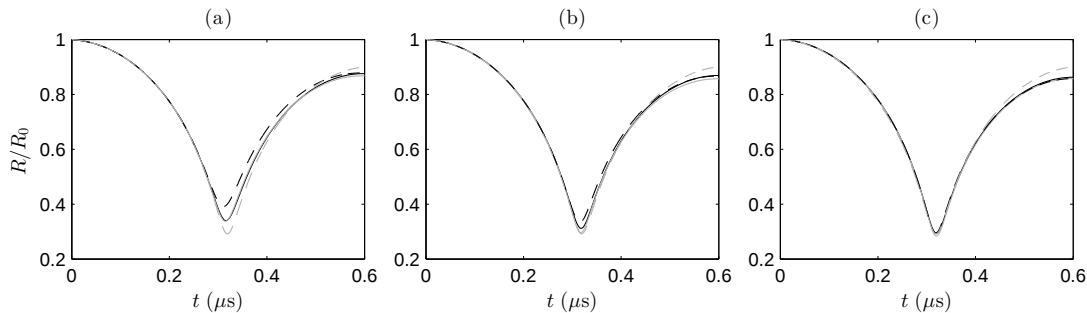


Figure 9: Temporal variations of the bubble radius R , normalized by R_0 , obtained using the meshes (a) $R_0 800$, (b) $R_0 1600$ and (c) $R_0 3200$ for the initial interface thickness — $\delta_{99}^{int} = 8\Delta r$, — $\delta_{99}^{int} = 16\Delta r$ and --- $\delta_{99}^{int} = 32\Delta r$; --- solution from the Rayleigh-Plesset equation (19).

3.3.4 Influence of the thermal conductivity

In order to show the influence of the thermal conduction, results are compared from simulations with and without conductivity, using the mesh $R_0 1600$ for an initial interface thickness of $16\Delta r = 0.01R_0$. The temporal variations of the temperature at the bubble center are shown in Figure 10(a). At $t = 0.315 \mu s$, the temperature obtained without conductivity is lower than that with conductivity. At any other time, the temperature evaluated without conductivity is slightly larger than that with conductivity.

The temporal variations of the bubble radius with and without conductivity are compared with the Rayleigh-Plesset solution in Figure 10(b). From $t = 0$ to $0.25 \mu s$, the three solutions are very similar. Then, at $t = 0.315 \mu s$, the minimum bubble radius is slightly larger without than with conductivity. Finally, when the bubble expands from $t = 0.35$ to $0.6 \mu s$, the bubble radii obtained from the simulation without conductivity and from the Rayleigh-Plesset equation (19) are in very good agreement. During this expansion, the bubble radius is smaller when the conductivity is included. This is due to the fact that the energy transmitted from the bubble into water is significantly different with and without conductivity. When conductive effects are taken into account, the energy loss is more important than when they are not [12]. Therefore, the bubble growth is weaker.

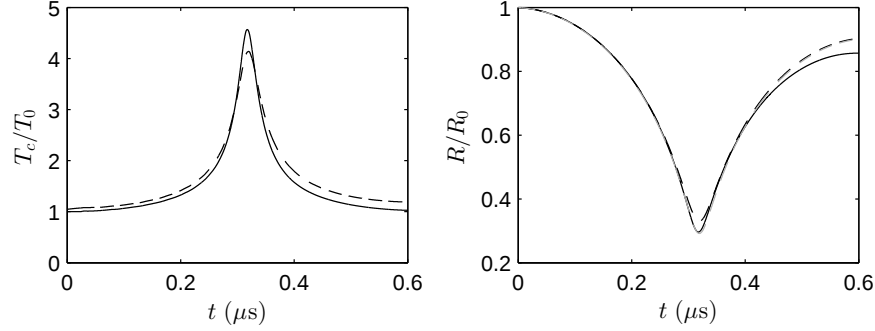


Figure 10: Temporal variations of (a) the temperature at the bubble center T_c normalized by T_0 and (b) the bubble radius R normalized by R_0 obtained — with and --- without conductivity for an initial interface thickness $\delta_{99}^{int} = 16\Delta r$ using $R_0 1600$; ... solution from the Rayleigh-Plesset equation (19).

4 Axisymmetric simulations of a near-wall bubble collapse

4.1 Initial conditions

The collapse of a bubble near a wall is now investigated by considering the initial flow configuration depicted in Figure 11. This configuration is similar to that of Johnsen and Colonius [18]. A spherical bubble filled with air is placed near a rigid plane wall, and is impacted by a plane shock wave propagating through water in the direction normal to the wall. The bubble of radius $R_0 = 10 \mu m$ is initially located at $z = z_b$ on the symmetry axis, and the wall is located at $z = z_{wall} = 0$. Three initial stand-off distances H_0 between z_b and z_{wall} , namely $H_0 = 1.2R_0$, $1.5R_0$ and $2R_0$, are studied.

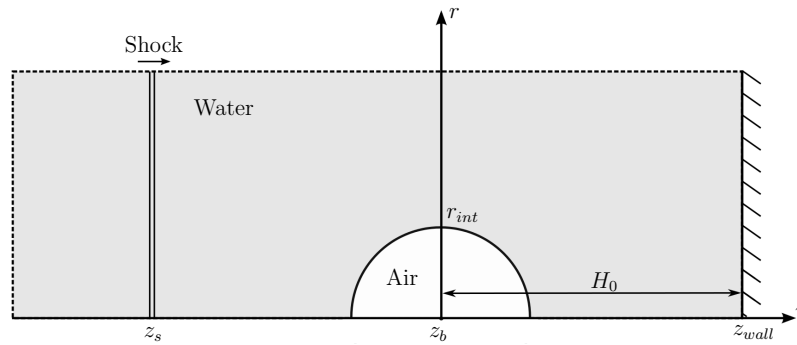


Figure 11: Initial configuration for the axisymmetric simulations of an air bubble collapsing in water near a wall; --- boundary of the domain, == plane shock wave.

The pressure in the bubble and in the water downstream of the shock wave is initially equal to $p_0 = 10^5$ Pa. The plane shock wave is generated at $z = z_s$ by imposing a pressure jump leading to $p_s = 353p_0$ [18]. The initial density and velocity used by Johnsen and

Colonius [18] not being clear, two different sets of conditions have been chosen in the present study. First, a density jump is imposed at the shock wave location and the velocity is null everywhere in the flow in order to represent initial conditions similar to those encountered in a shock tube. Second, a density jump and a velocity jump are imposed across the shock wave. The temperature is initially uniform in the whole computational domain, $T = 293$ K. In order to use the same parameters as Johnsen and Colonius [18] the quantities γ and B are set in this section to $\gamma = 6.68$ and $B = 4050 \times 10^5$ Pa. The density upstream of the shock wave ρ_s is computed from the pressure shock p_s using the Tait's equation of state:

$$p_s = B \left(\frac{\rho_s}{\rho_0} \right)^\gamma - B + A, \quad (20)$$

where $\rho_0 = 998 \text{ kg.m}^{-3}$ and $A = 10^5$ Pa. When the speed behind the shock u_s is not zero, it is determined from the relation taken from Lighthill's book [22]:

$$u_s^2 = \frac{(p_s - p_0)(\rho_s - \rho_0)}{\rho_s \rho_0}. \quad (21)$$

Thus, the initial conditions for density, axial velocity and pressure are:

$$(\rho, u_z, p) = \begin{cases} (1.189 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 10^5 \text{ Pa}) & \text{in the bubble} \\ (998 \text{ kg.m}^{-3}, 0, 10^5 \text{ Pa}) & \text{in water, for } z > z_s \\ (1010.6 \text{ kg.m}^{-3}, 0 \text{ or } 20.9 \text{ m.s}^{-1}, 353 \times 10^5 \text{ Pa}) & \text{in water, for } z < z_s \end{cases}$$

The simulations are carried out by solving the equations presented in Section 2, using (axisymmetric) cylindrical coordinates detailed in Appendix C.

4.2 Numerical parameters

The simulations are performed using three meshes, containing 283, 400 and 566 mesh cells in the initial bubble radius R_0 , denoted by R_{0283} , R_{0400} and R_{0566} , respectively. As previously for the simulation of the spherical bubble collapse, the method of Mohseni and Colonius [25] is employed close to $r = 0$. For the three grids, the sizes of the mesh cells in the r -direction Δr and in the z -direction Δz are uniform, and $\Delta r = \Delta z$ for $0 < r \leq 2.2R_0$ and $-9.5R_0 \leq z \leq 0$. In order to ensure that the pressure waves exiting the computational domain are damped before reaching the boundaries, the mesh cells are stretched in both directions until $r = 9R_0$ and $z = -11R_0$. The number of mesh cells in the r and z directions, and the time step Δt used for the three grids are given in Table 3.

	n_r	n_z	total number of cells	Δr (m)	Δt (s)
R_{0283}	693	2702	1.87×10^6	3.535×10^{-8}	6.44×10^{-12}
R_{0400}	950	3800	3.6×10^6	2.5×10^{-8}	4.55×10^{-12}
R_{0566}	1320	5360	7.07×10^6	1.768×10^{-8}	9.66×10^{-13}

Table 3: Number of mesh cells n_r in the r -direction, n_z in the z -direction, size Δr of the uniform grid cells around the bubble and time steps Δt using the meshes R_{0283} , R_{0400} and R_{0566} .

Radiation conditions are imposed at the boundaries of the computational domain [41].

The right boundary is a plane rigid wall of infinite impedance [18].

4.3 Results

4.3.1 Shock initially with zero speed

The solutions computed at times $t = 6.01, 18.76, 31.52$ and 51.56 ns for an initial stand-off distance of $H_0 = 1.5R_0$ are shown in Figure 12. The wall is located at the right boundary of each picture; time $t = 0$ corresponds to the instant of the first contact between the plane shock wave and the free-field side of the bubble. Numerical Schlieren fields are given in the upper-half pictures and pressure fields superimposed with the contour of $\gamma = 1.42$ are provided in the lower-half pictures. The γ contour allows us to identify the approximate location of the interface. All the pressure fields in the present section are represented using a logarithmic scale.

In Figures 12(a), the initial plane shock wave has impacted the bubble and propagates both in water and in air. It is visible below the bubble in the pressure field. Due to the shock-interface interaction, a reflected rarefaction wave propagating away from the wall in water has been generated [16] and the free-field side of the bubble interface has moved towards the wall. Note that the pressure waves are not visible in the Schlieren pictures because they are weak compared to the pressure waves encountered at later times. At $t = 18.76$ ns in Figure 12(b), the shock has already been reflected by the wall and now propagates away from it. Then, at $t = 31.52$ ns in Figure 12(c), the plane shock wave reflected by the wall is located on the left of the bubble. Finally, at $t = 51.56$ ns in Figure 12(d), the free-field side of the bubble has been advected towards the wall, and the wall-side of the bubble has moved away from the wall. Therefore, the two sides of the bubble move towards each other reducing significantly the volume of the bubble. The bubble collapse is initiated.

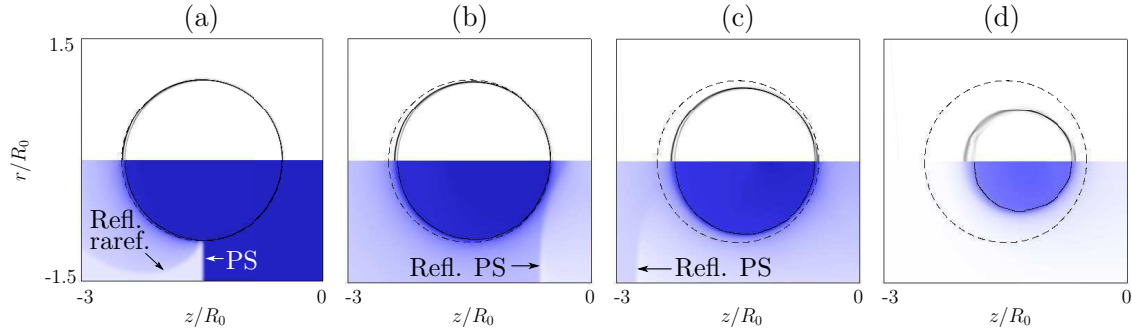


Figure 12: Numerical Schlieren pictures (top) and pressure fields superimposed onto — the contour of $\gamma = 1.42$ (bottom) obtained using R_0400 for an initial stand-off distance of $H_0 = 1.5R_0$ at times of (a) 6.01 ns, (b) 18.76 ns, (c) 31.52 ns and (d) 51.56 ns; --- initial location of the bubble. The wall is at $z = 0$. The Schlieren pictures and the pressure fields are represented using logarithmic scales ranging from 0 to 5×10^9 kg.m $^{-4}$ (from white to black) and from 31620 to 6.3×10^9 Pa (from blue to red). The letters Refl. raref., PS and Refl. PS denote the reflected rarefaction wave, the plane shock wave and the reflected plane shock wave, respectively.

The solutions obtained at $t = 62.49, 64.31, 66.13, 67.96, 69.78$ and 78.89 ns for $H_0 = 1.5R_0$ using the mesh R_0400 are represented in Figure 13. At $t = 62.49$ ns, in Figure 13(a), the

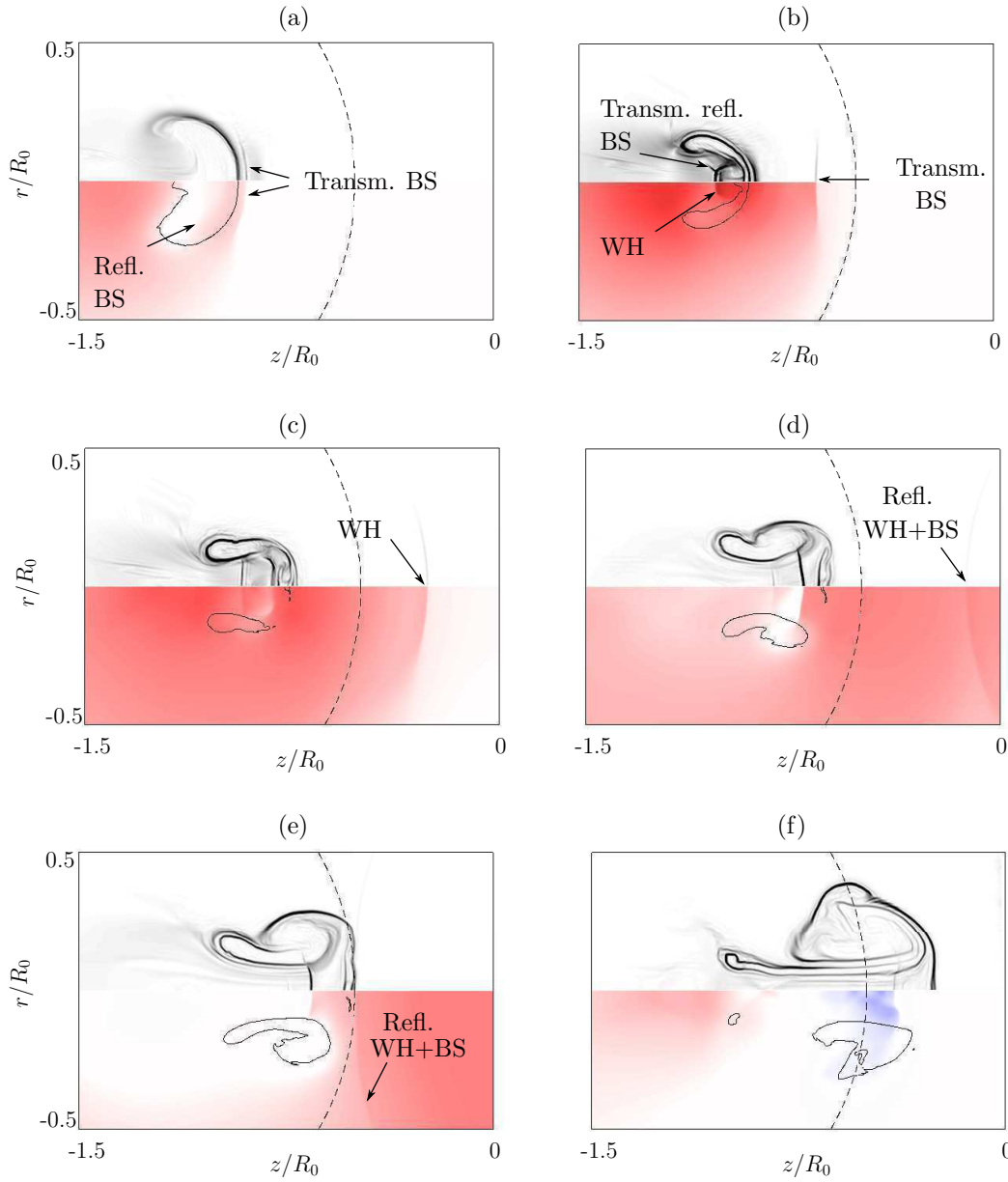


Figure 13: Numerical Schlieren pictures (top) and pressure fields superimposed onto — the contour of $\gamma = 1.42$ (bottom) obtained for $H_0 = 1.5R_0$ using $R_0/400$ at times of (a) 62.49 ns, (b) 64.31 ns, (c) 66.13 ns, (d) 67.96 ns, (e) 69.78 ns and (f) 78.89 ns; --- initial location of the bubble. The wall is at $z = 0$. The Schlieren pictures and the pressure fields are represented using logarithmic scales ranging from 0 to $5 \times 10^9 \text{ kg.m}^{-4}$ (from white to black) and from 31620 to $6.3 \times 10^9 \text{ Pa}$ (from blue to red). The letters Refl. BS, Transm. BS, Transm. refl. BS, WH and Refl. WH+BS denote the reflected, the transmitted and the transmitted reflected bow shock, and the water-hammer and the reflected water-hammer and bow shock, respectively.

free-field side of the bubble interface penetrates the bubble providing a bubble with a kidney shape. The re-entrant jet begins to develop. Furthermore, a transmitted bow shock visible in the water between the bubble and the wall in the pressure field and in the Schlieren picture. A reflected bow shock propagating away from the wall is also visualized in the pressure field inside the bubble. The bow shock has previously been observed by Hawker and Ventikos [16]. It is generated in the bubble because of the strong acceleration of the re-entrant jet. The transmitted bow shock also denoted as the *precursor shock* by Johnsen and Colonius [18] and the reflected bow shock appear when the bow shock exits the bubble through its wall-side.

At $t = 64.31$ ns, in Figure 13(b), the reflected bow shock has exited the bubble and continues in the water, away from the wall. It has been called a transmitted reflected bow shock by Hawker and Ventikos [16]. In addition, a water-hammer has been generated. The interaction of the water-hammer with the transmitted reflected bow shock makes an x -shape pressure wave which is observed to the left of the bubble on the axis. The water-hammer is generated when a very small volume of air is trapped inside the bubble on the symmetry axis. Therefore, the re-entrant jet is suddenly decelerated by the water confined between the bubble and the wall. Note that the water-hammer also propagates towards the wall but is not clearly visible at this time because of the presence of the sharp transmitted bow shock. The transmitted bow shock now looks like a planar shock and still propagates towards the wall between the bubble and the wall.

At $t = 66.13$ ns, in Figure 13(c), the water-hammer propagating towards the wall between the bubble and the wall is now identified. The bubble moves in the wall direction and its shape strongly changes. Because of the generation of the water-hammer, the air has been pushed away from the symmetry axis. Then, in Figures 13(d-f), the bubble grows and is still advected towards the wall. As in Johnsen and Colonius simulation [18], pressure waves are observed on the symmetry axis propagating inside the liquid jet. In addition, the water-hammer and the transmitted bow shock have been reflected by the wall and impact the wall-side of the bubble.

The temperature fields superimposed onto the contour of $\gamma = 1.42$ obtained at $t = 62.49$, 64.31, 66.13, 67.96, 78.89 and 98.93 ns for an initial stand-off distance of $H_0 = 1.5R_0$ using the mesh $R_0/400$ are shown in Figure 14. At $t = 62.49$ ns, in Figure 14(a), the temperature is approximately equal to 1600 K in the bubble and to 900 K in the re-entrant jet. At time $t = 64.31$ ns it reaches a maximum of 2500 K in the air. At later times, the temperature inside the bubble decreases to 1400 K at $t = 78.89$ ns in Figure 14(e). Finally, at $t = 78.89$ ns in Figure 14(f) the temperature in air and in the re-entrant jet is approximately 700 K.

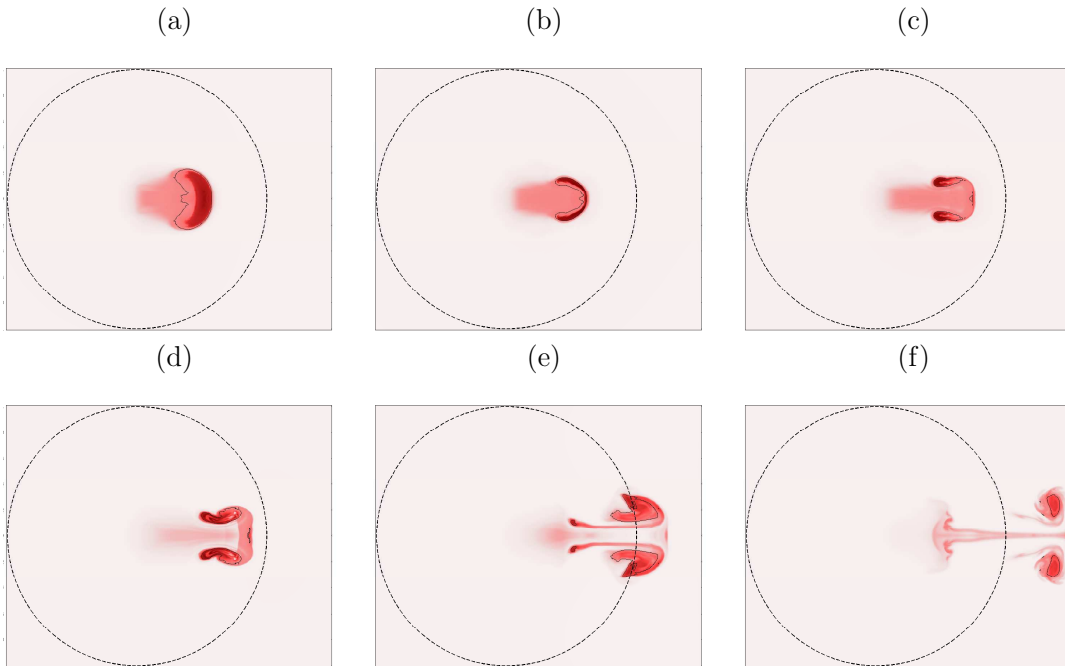


Figure 14: Temperature fields superimposed onto — the contour of $\gamma = 1.42$ obtained using R_0400 for an initial stand-off distance of $H_0 = 1.5R_0$ at times of (a) 62.49 ns, (b) 64.31 ns, (c) 66.13 ns, (d) 67.96 ns, (e) 78.89 ns and (f) 98.93 ns; --- initial location of the bubble. The temperature is represented using a logarithmic scale ranging from 224 to 2512 K, from white to red.

Grid convergence study

In order to examine the sensitivity of the numerical solutions to the mesh cell dimension, three simulations are performed for an initial stand-off distance of $H_0 = 2R_0$ using the meshes R_0283 , R_0400 and R_0566 . The temporal variations of the velocities of the free-field side and wall-side of the bubble, denoted u_{ff} and u_{ws} , respectively, are presented in Figure 15(a). These velocities are obtained from the left and right positions of the bubble interface. These positions arbitrarily correspond to the abscissa on the symmetry axis where $\gamma = 1.42$ [18].

From $t = 0$ to 65 ns, the velocity of the free-field side of the bubble increases because of the shock-interface interaction at $t = 0$. It reaches a maximum value of $u_{ff} = 814, 1060$ and 1120 m.s^{-1} using R_0283 , R_0400 and R_0566 , respectively. Then, the velocity decreases. This is due to the fact that the the side of the bubble meet at $t = 65$ ns. The wall-side of the interface is at rest from $t = 0$ to $t = 20$ ns. Then, its velocity decreases until $t = 65$ ns followed by a rapid increase until $t = 70$ ns before a final decrease. At $t = 20$ ns, the wall-side of the bubble is impacted by the shock wave which has been reflected by the wall, such that it moves away from the wall. It then suddenly slows down and starts to move towards the wall at $t = 65$ ns, due to the re-entrant jet travelling in the wall direction. Finally, both sides of the bubble are advected towards the wall. The velocities obtained with the meshes R_0283 and R_0400 are significantly different, whereas only small differences exist between the solutions obtained using R_0400 and R_0566 . Therefore, it seems that the mesh R_0400 provides reasonable solutions.

In Figure 15(b), the pressure values on the wall on the symmetry axis obtained using the three meshes are compared. It slightly increases at $t = 21$ ns when the initial plane shock wave hits the wall. Then, at $t = 33$ ns, the pressure on the wall decreases. This is due to the contact between a reflected rarefaction wave and the wall. This reflected rarefaction wave is generated when the initial plane shock wave which has been reflected by the wall is reflected back to the wall on the wall-side of the bubble. Then, after $t = 33$ ns the pressure increases until it reaches a maximum which is strongly different using R_0283 and the two other grids. The maximum pressure value is reached when the water-hammer hits the wall; it is equal to $2770p_0$, $4086p_0$ and $4355p_0$ using the grids R_0283 , R_0400 and R_0566 , respectively. In conclusion, the grid R_0400 provides a reasonable approximation of the pressure imposed on the wall.

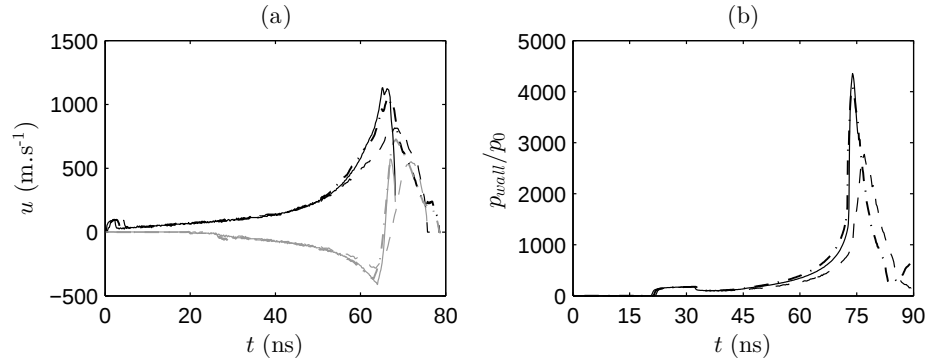


Figure 15: Temporal variations of (a) the velocities u_{ff} of the free-field side of the interface (black lines) and u_{ws} of the wall-side of the interface (grey lines) and of (b) the wall pressure p_{wall} on the symmetry axis, obtained for $H_0 = 2R_0$ using --- $R_0 283$, -.- $R_0 400$ and — $R_0 566$.

Influence of the initial stand-off distance

The pressure values p_{wall} obtained at the wall at the radial distances $r = 0$, $r = R_0$ and $r = 2R_0$ for the three initial stand-off distances $H_0 = 2R_0$, $1.5R_0$ and $1.2R_0$ are shown in Figure 16. They decrease with the radial distance r in all cases. The peak value is reached when the water-hammer hits the wall at $r = 0$. It is equal to $4200p_0$, $7200p_0$ and $16000p_0$ for $H_0 = 2R_0$, $1.5R_0$ and $1.2R_0$, respectively. Therefore, the nearer the bubble to the wall, the stronger the pressure that is measured on the wall. In addition, the water-hammer hits the wall later when it is farther from the bubble.

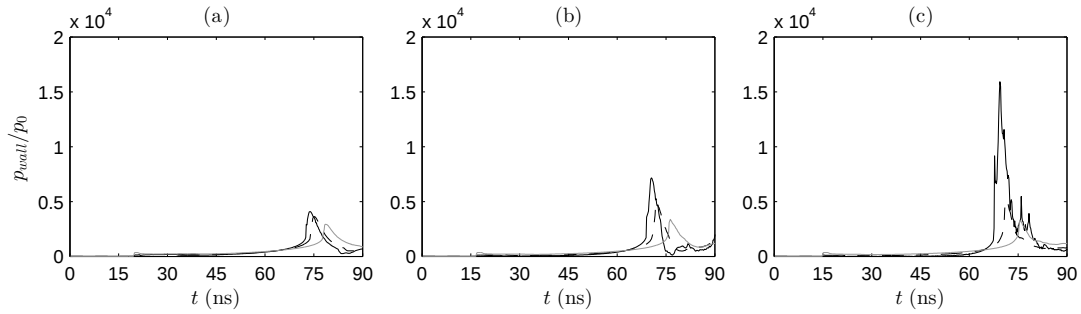


Figure 16: Temporal variations of the pressure on the wall p_{wall} normalized by the initial pressure p_0 obtained with $R_0 400$ at — $r = 0$, --- $r = R_0$ and -.- $r = 2R_0$ for the initial stand-off distances (a) $H_0 = 2R_0$, (b) $H_0 = 1.5R_0$ and (c) $H_0 = 1.2R_0$.

The radial profiles of the pressure values obtained at the wall at different times after the water-hammer has hit the wall are shown in Figure 17. The time evolution is indicated by the black arrow. For the three initial stand-off distances, the maximum of wall pressure decreases in time and also with the radial distance. Assuming that the water-hammer is a diverging pressure wave generated at a point on the symmetry axis, and that the fluid is homogeneous near the wall, the theory of linear acoustic propagation allows us to predict that the amplitude of this pressure wave decreases proportionally to $1/r$. As proposed by

Johnsen and Colonius [18], this can be verified by comparing the radial evolution of the maximum of the wall pressures with:

$$p_{wall}(r) = \frac{a}{\sqrt{H_c^2 + r^2}} + b, \quad (22)$$

where r is the radial coordinate along the wall, and a and b are constants which are determined from two known values of the pressure. The quantity H_c is the distance between the wall and the axial location where the collapse takes place, and is equal to $H_c = 1.5R_0$, $0.78R_0$ and $0.25R_0$ for $H_0 = 2R_0$, $1.5R_0$ and $1.2R_0$, respectively. For the three initial stand-off distances, the numerical results are in good agreement with the solution computed from the equation (22) also represented in Figure 17. Therefore, the amplitude of the pressure wave impacting the wall decreases proportionally to $1/r$.

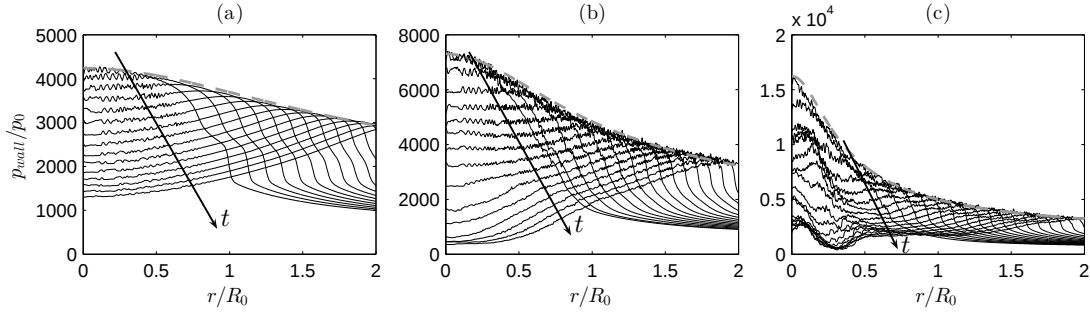


Figure 17: Representations of the wall pressure p_{wall} , normalized by p_0 , as a function of the radial coordinate r/R_0 obtained at different times using $R_0 400$ for an initial stand-off distance of (a) $H_0 = 2R_0$, (b) $H_0 = 1.5R_0$ and (c) $H_0 = 1.2R_0$; --- equation (22).

The temporal variation of the velocities u_{ff} and u_{ws} of the free-field side and wall-side of the bubble at $r = 0$ obtained using $R_0 400$ for the three initial stand-off distances are presented in Figure 18. From $t = 0$ to 40 ns, the velocity of the free-field interface which is also the velocity of the re-entrant jet is the same in the three cases. Afterwards, it rapidly increases and exhibits a maximum value of $u_{ff} = 1057$, 1315 and 1643 m.s⁻¹ for $H_0 = 2R_0$, $1.5R_0$ and $1.2R_0$. Thus, the closer the bubble to the wall, the sooner the maximum jet velocity that is reached. The velocity of the wall-side of the bubble is zero from $t = 0$ to 20 ns. Subsequently, it decreases until $t = 62$ ns and reaches the minimum values of $u_{ws} = -366.4$, -320.1 and -236 m.s⁻¹ for $H_0 = 2R_0$, $1.5R_0$ and $1.2R_0$. Therefore, the wall-side of the bubble travels faster away from the wall when the wall is far from it.

4.3.2 Shock initially with non-zero speed

In order to deal with initial conditions as close as possible to those of Johnsen and Colonius [18], a non-zero initial speed of the plane shock wave is now considered. In Figure 19, the solutions obtained using the grid $R_0 400$ for $H_0 = 2R_0$ are compared with the results of Ref.[18]. The temporal variations of the velocities of the free-field side and the wall-side sides of the bubble, u_{ff} and u_{ws} , are shown in Figure 19(a) and the temporal variations of the wall pressure on the symmetry axis are presented in Figure 19(b).

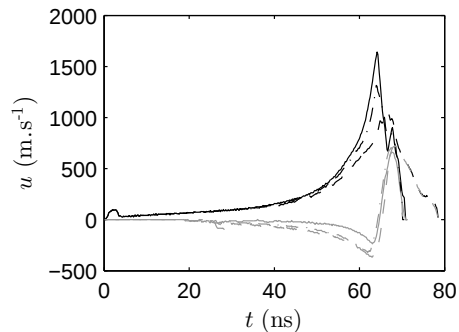


Figure 18: Temporal variations of the velocities u_{ff} of the free-field side (black lines) and u_{ws} of the wall-side (grey lines) of the bubble, obtained using the grid $R_0 400$ for the initial stand-off distances of --- $H_0 = 2R_0$, -.- $H_0 = 1.5R_0$ and — $H_0 = 1.2R_0$.

From $t = 0$ to 41 ns, the temporal evolution of the velocity u_{ff} from the present simulation is slightly higher than Johnsen's result but are qualitatively similar. After $t = 41$, the present solution exhibits two maxima equal to 836 m.s^{-1} at $t = 47.5$ ns and to 1039 m.s^{-1} at $t = 53$ ns. The velocity u_{ff} obtained by Johnsen and Colonius [18] increases from $t = 0$ to 47 when it reaches one maximum of 1254 m.s^{-1} .

The two solutions for the velocity of the wall-side interface show a similar evolution. The present results are slightly retarded in time compared to the results from Johnsen and Colonius [18]. Indeed, in the first case, the minimum velocity equal to -365 m.s^{-1} is reached at $t = 48$ ns, while it is observed at $t = 44$ ns in the second one.

The small differences observed between the two simulations may be due to the viscous effects that are not included in the simulation of Johnsen and Colonius [18]. For instance, it has been shown by Popinet and Zaleski [30] and by Minsier *et al.* [24] that viscosity modifies the re-entrant jet velocity.

In Figure 19(b), the value of the pressure at the wall obtained on the symmetry axis in the present study and in the work of Johnsen and Colonius are very similar. They reach a maximum value of $6046p_0$ at time $t = 56.3$ ns in the present simulation and to $5629p_0$ at $t = 56$ ns in the computation of Johnsen and Colonius [18].

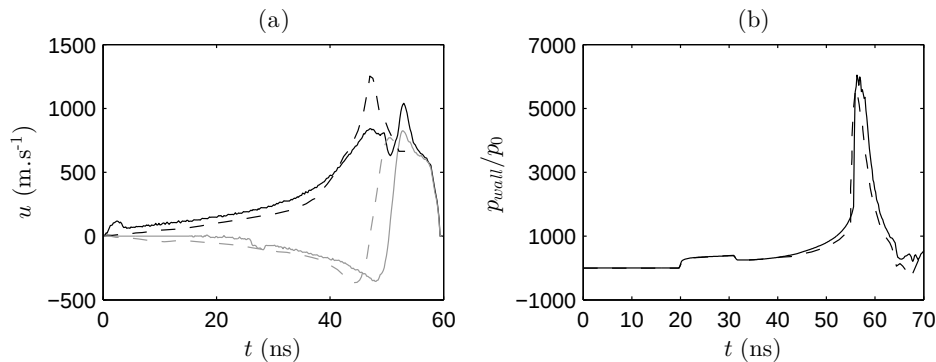


Figure 19: Temporal variation of (a) the velocities of the free-field interface u_{ff} (in black) and the wall-side interface u_{ws} (in grey) and of (b) the pressure on the wall p_{wall} . Solutions from --- Johnsen and Colonius [18] and — the present simulation for $H_0 = 2R_0$ with $R_0 400$.

5 Conclusions and perspectives

Simulations of the collapse of a spherical air bubble in water including compressibility, viscosity and conductivity of both fluids have been carried out using high-order finite difference schemes. In order to validate the present method, the spherical bubble collapse is simulated using spherical coordinates. The numerical results are in good agreement with the solutions predicted by the Rayleigh-Plesset model for weakly compressible water. It is observed that the selective filter used to remove grid-to-grid oscillations may damp the solutions if it is too frequently applied. It is also found that the thermal conductivity significantly affects the bubble expansion after the collapse. In addition, the initial interface thickness has to be thin enough to obtain a minimum bubble radius comparable to that predicted by the model but it also has to be thick enough to avoid numerical damping.

Axisymmetric simulations of a collapsing bubble placed near to a wall were conducted subsequently. The collapse is initiated by a plane shock wave impacting the bubble at equilibrium with the surrounding water. A re-entrant jet crossing the bubble in the direction of the wall is clearly observed. Its velocity is of the order of the speed of sound in water. Very high values of temperature are obtained in air. In addition, the re-entrant jet is heated during the collapse. Finally, the study of the influence of the distance between the wall and the bubble has shown that the closer the bubble is to the wall, the faster the re-entrant jet propagates and the stronger the wall impact is.

In future work, the near-wall bubble collapse will be simulated using a finer mesh in order to confirm the convergence of the solutions. In order to make comparisons with the study of Johnsen and Colonius [18], the influence of the stand-off distance on the solutions will be investigated for a plane shock wave with a non-zero initial shock speed. In addition, the influence of the viscosity on the velocity of the re-entrant jet will be studied. As the initial thickness of the interface has a significant effect on the spherical bubble collapse, it should be interesting to quantify the sensitivity of the near-wall bubble collapse to the initial interface thickness.

Acknowledgements

This work was performed using HPC resources of P2CHPD (Pôle de Calcul Hautes Performances Dédiés) of Université Lyon 1 (Mésocentre FLMSN). This work was performed within the framework of the Labex CeLyA of Université de Lyon operated by the French National Research Agency (ANR). PDMS gratefully acknowledges Dr Stephen J. Shaw of Xi'an Jiaotong-Liverpool University for useful discussions.

A Viscosity, thermal conductivity and thermal expansion for air and water

The shear viscosity μ , the bulk viscosity μ_b and the thermal conductivity λ are estimated using empirical relations as a function of temperature. The shear viscosity of air is computed from Sutherland's equation [40],

$$\mu_{air} = \mu(T_0) \left(\frac{T_0 + S}{T + S} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)^{(3/2)}, \quad (23)$$

where $\mu(T_0) = 1.716 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ is the shear viscosity of air at temperature $T_0 = 273 \text{ K}$ and $S = 130 \text{ K}$ is a constant. The water shear viscosity μ_{H_2O} is obtained from the experimental measurements of Beaton [4], yielding

$$\mu_{H_2O} = 17.31 \exp(-0.03476T) + 1.464 \times 10^{-3} \exp(-0.004714T). \quad (24)$$

The bulk viscosities of air and water are computed from the relations proposed by Rossing [32]:

$$\mu_{b_{air}} = 0.6\mu_{air} \quad \text{and} \quad \mu_{b_{H_2O}} = 3\mu_{H_2O}. \quad (25)$$

The thermal conductivity of air λ_{air} is determined using the Prandtl number $Pr = 0.7$, as

$$\lambda_{air} = \frac{\mu_{air} c_{p,air}}{Pr} \quad (26)$$

where $c_{p,air} = \gamma_{air} c_{v,air}$ is the heat capacity of air at constant pressure obtained from the air heat capacity at constant volume $c_{v,air} = 717.5 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ and the heat capacity ratio $\gamma_{air} = 1.4$. The expression for the thermal conductivity of water λ_{H_2O} is determined by fitting the experimental data of Beaton [4], providing:

$$\lambda_{H_2O} = 0.597 + 0.0017(T - 300) - 7.5 \times 10^{-6}(T - 300)^2. \quad (27)$$

The thermal expansion of air β_{air} is obtained from

$$\beta_{air} = \frac{1}{T},$$

and that of water β_{H_2O} is estimated from Beaton's experimental data [4], yielding

$$\beta_{H_2O} = a_1 T^5 + a_2 T^4 + a_3 T^3 + a_4 T^2 + a_5 T + a_6$$

where $a_1 = -2.114 \times 10^{-15}$, $a_2 = -1.178 \times 10^{-12}$, $a_3 = 2.658 \times 10^{-9}$, $a_4 = -1.497 \times 10^{-6}$, $a_5 = 3.705 \times 10^{-4}$ and $a_6 = -3.474 \times 10^{-2}$.

B Governing equations in spherical coordinates

The spherical collapse of an air bubble surrounded by water and impacted by a spherically converging shock wave, presented in Section 3, is simulated by solving the Navier-Stokes equations using spherical coordinates. These equations are detailed below using Bird's work [6].

The spherical coordinates (r, θ, ϕ) are obtained from the Cartesian coordinates (x, y, z) as:

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta = \arccos\left(\frac{z}{r}\right) \\ \phi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right) \end{cases}$$

The velocity vector $\mathbf{u}$ is expressed as $\mathbf{u} = u_r \mathbf{e}_r + u_\theta \mathbf{e}_\theta + u_\phi \mathbf{e}_\phi$ where $\mathbf{e}_r$, $\mathbf{e}_\theta$ and $\mathbf{e}_\phi$ are the unit vectors in the r , θ and ϕ directions. In the present study, a spherical problem is considered. Therefore, the velocities u_θ and u_ϕ and all the spatial derivatives in θ and ϕ are null. Thus, the equations governing density, momentum and total energy become:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \rho u_r)}{\partial r} = 0, \\ \frac{\partial(\rho u_r)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \rho u_r^2) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \tau_{rr})}{\partial r} - \frac{\tau_{\theta\theta} + \tau_{\phi\phi}}{r}, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 u_r E) = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 p u_r) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \tau_{rr} u_r) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(-\lambda r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right), \end{cases} \quad (28)$$

where the components of the strain tensor τ are expressed as

$$\begin{cases} \tau_{rr} = 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r} + \left(\mu_b - \frac{2}{3}\mu \right) \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 u_r) \right), \\ \tau_{\theta\theta} = \tau_{\phi\phi} = 2\mu \frac{u_r}{r} + \left(\mu_b - \frac{2}{3}\mu \right) \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 u_r) \right). \end{cases}$$

In addition, the two 1-D advection equations governing the interface are:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) + u_r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) + u_r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) = 0. \end{cases} \quad (29)$$

Finally, the equation for temperature is

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \rho u_r T)}{\partial r} = & \frac{\beta T}{c_p} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_r \frac{\partial p}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{c_p} \left[\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{u_r}{r} \right)^2 \right] \\ & + \frac{(\mu_b - (2/3)\mu)}{c_p} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 u_r)}{\partial r} \right)^2 - \frac{1}{r^2 c_p} \frac{\partial(r^2 q_r)}{\partial r}. \end{aligned} \quad (30)$$

C Governing equations in cylindrical coordinates

The axisymmetric simulations of the near-wall collapse of an air bubble surrounded by water and impacted by a plane shock wave, presented in Section 4, is simulated by solving the governing equations using cylindrical coordinates.

The cylindrical coordinates (r, θ, z) are related to the Cartesian coordinates (x, y, z) by the following definitions:

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta = \arctan\left(\frac{y}{x}\right) \\ z = z \end{cases}$$

The velocity vector $\mathbf{u}$ is expressed as $\mathbf{u} = u_r \mathbf{e}_r + u_\theta \mathbf{e}_\theta + u_z \mathbf{e}_z$ where $\mathbf{e}_r$, $\mathbf{e}_\theta$ and $\mathbf{e}_z$ are the unit vectors in the r , θ and z directions. In the present study, the near-wall bubble collapse is an axisymmetric flow. Therefore, the cylindrical coordinates are used for the simulations. Therefore, all the components in the θ directions are null. The equations governing density, momentum and total energy are:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho u_r)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial(\rho u_r)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r(p + \rho u_r^2)) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_r u_z) = \frac{1}{r} \frac{\partial(r \tau_{rr})}{\partial r} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} + \frac{p}{r} - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r}, \\ \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho u_r u_z) + \frac{\partial}{\partial z}(p + \rho u_z^2) = \frac{1}{r} \frac{\partial(r \tau_{rz})}{\partial r} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z}, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r u_r (E + p)) + \frac{\partial}{\partial z}(u_z (E + p)) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r(u_r \tau_{rr} + u_z \tau_{rz} - q_r)) \\ \quad + \frac{\partial}{\partial z}(u_r \tau_{rz} + u_z \tau_{zz} - q_z), \end{cases} \quad (31)$$

where

$$\begin{aligned}
\tau_{rr} &= 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r} + \left(\mu_b - \frac{2}{3}\mu \right) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(ru_r)}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right), \\
\tau_{zz} &= 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z} + \left(\mu_b - \frac{2}{3}\mu \right) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(ru_r)}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right), \\
\tau_{\theta\theta} &= 2\mu \frac{u_r}{r} + \left(\mu_b - \frac{2}{3}\mu \right) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(ru_r)}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right), \\
\tau_{rz} &= \mu \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \\
q_r &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial r}, \\
q_z &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial z}.
\end{aligned}$$

The two advection equations governing the interface are given by:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) + u_r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) + u_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) &= 0, \\
\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) + u_r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) + u_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\gamma B}{\gamma - 1} \right) &= 0.
\end{aligned} \tag{32}$$

Finally, the temperature equation is expressed as:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho T u_r)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho T u_z)}{\partial z} &= \frac{\beta T}{c_p} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_r \frac{\partial p}{\partial r} + u_z \frac{\partial p}{\partial z} \right) \\
&+ \frac{2\mu}{c_p} \epsilon_{ij} \epsilon_{ij} + \frac{(\mu_b - \frac{2}{3}\mu)}{c_p} \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 \\
&- \frac{1}{c_p} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(-r\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right],
\end{aligned} \tag{33}$$

where $\epsilon_{ij}\epsilon_{ij}$ is

$$\epsilon_{ij}\epsilon_{ij} = \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{u_r}{r} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2.$$

References

- [1] R. Abgrall. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : A quasi conservative approach. *Journal of Computational Physics*, 125:150–160, 1996.
- [2] G. Allaire, S. Clerc, and S. Kokh. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *Journal of Computational Physics*, 181(2):577–616, 2002.
- [3] G. K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*, 2000.
- [4] C.F. Beaton. *Heat Exchanger design handbook : Properties of saturated fluids*. Begell, 2002.

- [5] S.A. Beig and E. Johnsen. Maintaining interface equilibrium conditions in compressible multiphase flows using interface capturing. *Journal of Computational Physics*, 302:548–566, 2015.
- [6] R.B. Bird. Transport phenomena. *Applied Mechanics Reviews*, 55(1):R1–R4, 2002.
- [7] C. Bogey and C. Bailly. A family of low dispersive and low dissipative explicit schemes for flow and noise computations. *Journal of Computational Physics*, 194:194–214, 2004.
- [8] C. Bogey, N. De Cacqueray, and C. Bailly. A shock-capturing methodology based on adaptative spatial filtering for high-order non-linear computations. *Journal of Computational Physics*, 228:1447–1465, 2009.
- [9] C.E. Brennen. *Cavitation and bubble dynamics*. Oxford University Press, 1995.
- [10] J.L. Bull. The application of microbubbles for targeted drug delivery. *Expert opinion on drug delivery*, 4(5):475–493, 2007.
- [11] M. Capuano, C. Bogey, and P.D.M. Spelt. Simulations of viscous and compressible gas-gas flows using high-order finite difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 361:56–81, 2018.
- [12] R.B. Chapman and M.S. Plesset. Thermal effects in the free oscillation of gas bubbles. *Journal of Basic Engineering*, 93(3):373–376, 1971.
- [13] S.S. Cook. Erosion by water-hammer. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 119(783):481–488, 1928.
- [14] V. Coralic and T. Colonius. Finite-volume WENO scheme for viscous compressible multicomponent flows. *Journal of Computational Physics*, 274:95–121, 2014.
- [15] A.A. Doinikov. Equations of coupled radial and translational motions of a bubble in a weakly compressible liquid. *Physics of Fluids*, 17(12):128101, 2005.
- [16] N.A. Hawker and Y. Ventikos. Interaction of a strong shockwave with a gas bubble in a liquid medium: a numerical study. *Journal of Fluid Mechanics*, 701:59–97, 2012.
- [17] E. Johnsen and T. Colonius. Implementation of WENO schemes in compressible multicomponent flow problems. *Journal of Computational Physics*, 219:715–732, 2006.
- [18] E. Johnsen and T. Colonius. Numerical simulations of non-spherical bubble collapse. *Journal of Fluid Mechanics*, 629:231–262, 2009.
- [19] S. Jolgam, A. Ballil, A. Nowakowski, and F. Nicolleau. On equations of state for simulations of multiphase flows. In *World Congress on Engineering 2012. July 4-6, 2012. London, UK.*, volume 3, pages 1963–1968. International Association of Engineers, 2012.
- [20] J.W. Kim and D.J. Lee. Adaptive nonlinear artificial dissipation model for computational aeroacoustics. *AIAA journal*, 39(5):810–818, 2001.

-
- [21] W. Lauterborn and H. Bolle. Experimental investigations of cavitation-bubble collapse in the neighbourhood of a solid boundary. *Journal of Fluid Mechanics*, 72(2):391–399, 1975.
 - [22] M.J. Lighthill. *Waves in fluids*. Cambridge university press, 2001.
 - [23] O. Lindau and W. Lauterborn. Cinematographic observation of the collapse and rebound of a laser-produced cavitation bubble near a wall. *Journal of Fluid Mechanics*, 479:327–348, 2003.
 - [24] V. Minsier, J. De Wilde, and J. Proost. Simulation of the effect of viscosity on jet penetration into a single cavitating bubble. *Journal of Applied Physics*, 106(8):084906, 2009.
 - [25] K. Mohseni and T. Colonius. Numerical treatment of polar coordinate singularities. *Journal of Computational Physics*, 157(2):787–795, 2000.
 - [26] S. Nagrath, K. Jansen, R.T. Lahey, and I. Akhatov. Hydrodynamic simulation of air bubble implosion using a level set approach. *Journal of Computational Physics*, 215(1):98–132, 2006.
 - [27] C-D. Ohl and R. Ikink. Shock-wave-induced jetting of micron-size bubbles. *Physical review letters*, 90(21):214502, 2003.
 - [28] C-D. Ohl, T. Kurz, R. Lindau O. Geisler, and W. Lauterborn. Bubble dynamics, shock waves and sonoluminescence. *The Royal Society*, 357:269–294, 1999.
 - [29] B.J. Plohr. Shockless acceleration of thin plates modeled by a tracked random choice method. *AIAA Journal*, 26(4):470–478, 1988.
 - [30] S. Popinet and S. Zaleski. Bubble collapse near a solid boundary: a numerical study of the influence of viscosity. *Journal of Fluid Mechanics*, 464:137–163, 2002.
 - [31] Lord Rayleigh. Viii. on the pressure developed in a liquid during the collapse of a spherical cavity. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 34(200):94–98, 1917.
 - [32] T.D. Rossing. Springer handbook of acoustics. *Springer*, 2007.
 - [33] R. Saurel and R. Abgrall. A multiphase godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2):425–467, 1999.
 - [34] R. Saurel, P. Bovin, and O. Le Metayer. A general formulation for cavitating, boiling and evaporating flows. *Computers and Fluids*, 128:53–64, 2016.
 - [35] S. Shaw. Personal communication.
 - [36] S.J. Shaw, Y.H. Jin, W.P. Schiffrs, and D.C. Emmony. The interaction of a single laser-generated cavity in water with a solid surface. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 99(5):2811–2824, 1996.

- [37] S.J. Shaw and P.D.M. Spelt. Shock emission from collapsing gas bubbles. *Journal of Fluid Mechanics*, 646:363–373, 2009.
- [38] K-M. Shyue. An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems. *Journal of Computational Physics*, 142:208–242, 1998.
- [39] B.D. Storey and A.J. Szeri. Water vapour, sonoluminescence and sonochemistry. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 456(1999):1685–1709, 2000.
- [40] W. Sutherland. The viscosity of gases and molecular force. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 36(223):507–531, 1893.
- [41] C.K.W. Tam and Z. Dong. Radiation and outflow boundary conditions for direct computation of acoustic and flow disturbances in a non uniform mean flow. *Journal of Computational Acoustics*, 4:175–201, 1996.
- [42] V.K. Tritschler, X.Y. Hu, S. Hickel, and N.A. Adams. Numerical simulation of a Richtmyer-Meshkov instability with an adaptive central-upwind sixth-order WENO scheme. *Physica Scripta*, 2013(T155):014016, 2013.
- [43] C.K. Turangan, A.R. Jamaluddin, G.J. Ball, and T.G. Leighton. Free-lagrange simulations of the expansion and jetting collapse of air bubbles in water. *Journal of Fluid Mechanics*, 598:1–25, 2008.

Conclusion

Dans le cadre de cette thèse, des écoulements diphasiques compressibles, visqueux et conductifs, ont été simulés à l'aide de schémas aux différences finies centrées d'ordre élevé. Le chapitre 1 rappelle les principaux modèles et méthodes numériques employés dans la littérature. En particulier, le modèle à un fluide (*single-fluid formulation*) et les méthodes de capture d'interface qui sont utilisés dans la présente étude.

Le second chapitre expose les équations choisies au cours de la thèse afin de décrire les écoulements constitués de deux gaz ou d'un liquide et d'un gaz. Il s'agit des équations de conservation de la masse volumique, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale. Elles sont complétées de deux équations d'advection écrites sous forme non conservative gouvernant l'interface et d'une équation permettant d'estimer la température dans un liquide et dans un gaz. De plus, l'hypothèse de continuité de la pression à l'interface est utilisée.

Le chapitre 3 détaille les différentes méthodes numériques employées dans le cadre de cette thèse afin de simuler des écoulements contenant des ondes de pression et une interface déformable entre deux fluides. Ces méthodes ont précédemment été développées pour l'aéroacoustique dans le but de minimiser les erreurs de dispersion et de dissipation numériques. Certaines d'entre elles ont dû être adaptées à la simulation d'écoulements diphasiques. Par exemple, la procédure de capture de choc a été modifiée de façon à capturer des ondes de choc et des interfaces. De cette manière, une seule procédure permet de capturer toutes les discontinuités présentes au sein d'un écoulement diphasique compressible.

Le quatrième chapitre consiste à valider les choix des équations et des méthodes numériques par la résolution de dix cas tests monodimensionnels. Pour l'ensemble des cas test, les résultats sont en bon accord avec les solutions analytiques ou de référence. Les interfaces, ondes de choc et diverses ondes de pression sont correctement propagées et faiblement dissipées. Un cas test portant sur l'advection d'une interface entre deux fluides à vitesse et pression constante a permis de justifier le choix des équations gouvernant les déplacements de l'interface et de mettre en évidence l'efficacité des indicateurs de monotonie lors de la capture des discontinuités. Ceux-ci ont été développés dans le but d'appliquer une seule mé-

thode permettant de capturer à la fois des ondes de choc et des interfaces sans dissiper les solutions significativement. Les oscillations de Gibbs sont alors supprimées tout en conservant des discontinuités fortes. Il est également observé que le choix des équations d'advection décrivant les déplacements de l'interface et le choix des variables sur lesquelles les filtrages sont appliqués sont très importants afin d'éviter l'apparition d'oscillations numériques.

Le chapitre 5 présente l'étude de deux écoulements 2D constitués de deux gaz parfaits. Le premier écoulement comprend de l'air et du SF₆ séparés par une interface légèrement perturbée et impactée par une onde de choc plane. Le second écoulement est composé d'une bulle cylindrique remplie d'hélium ou de R22, qui est frappée par une onde de choc plane se propageant dans l'air. Pour les deux écoulements, une étude de convergence de maillage est effectuée indiquant que les schémas numériques d'ordre élevé permettent d'obtenir des résultats convergés en utilisant un maillage relativement grossier. De plus, les résultats numériques sont en très bon accord avec les données expérimentales de la littérature. Toutes les vitesses moyennes de propagation des ondes de pression et de l'interface sont correctement prédites. L'instabilité de Richtmyer-Meshkov particulièrement reconnaissable par sa forme ressemblant à un champignon se développe à l'interface. La vitesse de déplacement de l'interface ainsi que l'amplitude du champignon sont en très bon accord avec l'expérience. Il est observé que la procédure de capture des discontinuités modifie la forme de l'instabilité par la formation de petites perturbations sur l'interface. L'origine de ces perturbations n'est pas encore connue. Cependant, la procédure de capture des discontinuités ne modifie pas les solutions obtenues pour la bulle cylindrique. Il est montré que la concentration d'air initialement contenue dans la bulle d'hélium change significativement la propagation des ondes de pression à l'intérieur de la bulle et modifie aussi la déformation de la bulle. Les effets visqueux ont aussi un effet notable sur le développement de petites instabilités sur l'interface de la bulle. Enfin, ce second écoulement montre que la masse de la bulle n'est pas parfaitement conservée au cours de la simulation. Ce phénomène n'étant pas une erreur numérique, il s'agit donc d'une limitation liée aux équations décrivant l'interface. Afin d'éviter que la masse varie au cours de la simulation il est possible de résoudre une équation d'advection conservative de la fraction massique d'un des deux fluides.

Enfin, le chapitre 6 expose les résultats obtenus pour l'implosion d'une bulle d'air dans l'eau. Afin de vérifier que les méthodes numériques permettent de simuler un écoulement air-eau correctement, l'implosion sphérique d'une bulle est considérée afin de comparer les résultats obtenus aux solutions prédites par le modèle de Rayleigh-Plesset. Il est observé que le filtrage sélectif utilisé pour supprimer les oscillations maille à maille peut dissiper les solutions lorsqu'il est trop fréquemment appliqué. Il est également montré que la conductivité thermique affecte significativement la bulle pendant son expansion. De plus, l'épaisseur

initiale de l'interface doit être suffisamment faible pour obtenir une bulle avec un rayon minimum comparable à celui prédit par le modèle, mais l'interface doit aussi être suffisamment épaisse afin d'éviter que les solutions soient dissipées numériquement. L'implosion non sphérique d'une bulle est ensuite étudiée à l'aide de simulations axisymétriques d'une bulle placée à proximité d'un mur. L'implosion est provoquée par l'interaction de la bulle avec une onde de choc plane. Un jet d'eau traversant la bulle de part en part dans la direction du mur est observé. Sa vitesse est de l'ordre de la vitesse de propagation du son dans l'eau. De très hautes températures sont obtenues dans la bulle, et le jet est aussi chauffé au cours de l'implosion. Les diverses ondes de pression observées au cours de l'implosion ont aussi été observées dans la littérature. Enfin, une étude de l'influence de la distance entre le mur et la bulle montre que plus la bulle est proche du mur, plus le jet se déplace rapidement et plus l'impact sur le mur est important.

Les travaux majeurs effectués au cours de la thèse ont donc consisté à :

- développer une procédure de capture des discontinuités basée sur une méthode de capture d'ondes de choc.
- choisir et tester différentes équations permettant de décrire les écoulements diphasiques à l'aide d'un grand nombre de cas test.
- fixer les paramètres numériques pour toutes les simulations. Il a fallu, par exemple, choisir judicieusement le seuil de la procédure de capture des discontinuités ainsi que les variables de l'écoulement sur lesquelles les filtrages sont appliqués.
- développer quatre codes de résolution des équations de Navier-Stokes écrites à l'aide de coordonnées Cartésiennes, cylindriques et sphériques.

Grâce à ces travaux, l'ensemble des méthodes proposées peut être employé pour simuler des écoulements fortement compressibles constitués de deux gaz parfaits ou d'un liquide et d'un gaz. Dans le cas d'une simulation présentant un très faible pas de temps il est conseillé de ne pas appliquer le filtrage sélectif à chaque itération. Lorsque cela est possible, il est également préconisé de vérifier que la masse de chaque fluide ou d'un des deux fluides de l'écoulement est assez bien conservée. Autrement, il est aussi acceptable de choisir une autre équation décrivant l'interface comme l'équation d'advection conservative de la fraction massique d'un des deux fluides qui permet de conserver la masse des différents fluides de l'écoulement. En effet, il a été vérifié au cours de la thèse que les méthodes numériques présentées dans cette étude sont également appropriées pour la résolution de différentes équations d'advection de l'interface.

Perspectives

Plusieurs perspectives à ce travail peuvent être notées. En particulier, les codes de résolutions des équations de Navier-Stokes développés au cours de la thèse peuvent être utilisés pour effectuer d'autres simulations d'écoulements diphasiques.

Des simulations de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov peuvent être menées en considérant différentes perturbations initiales de l'interface. Ainsi, l'influence de cette perturbation sur le développement de l'instabilité pourrait être décrite.

Il a été montré à l'aide des simulations de l'implosion sphérique d'une bulle d'air dans l'eau que les solutions dépendent de l'épaisseur initiale de l'interface. Il serait donc intéressant d'étudier l'influence de cette épaisseur sur l'implosion non-sphérique d'une bulle proche d'un mur. De plus, l'effet de la viscosité et de la conductivité thermique sur l'implosion non sphérique de la bulle et sur le chargement imposé au mur pourrait aussi être mis en évidence en faisant varier la viscosité ou en ne prenant pas en compte les flux conductifs. Il serait également important d'inclure les effets liés à la tension surfacique afin d'observer si ceux-ci sont significatifs lors de l'implosion d'une bulle. De plus, il serait utile de simuler différents types d'implosions d'une bulle à proximité d'un mur qui ont été étudiés expérimentalement afin d'obtenir des résultats inaccessibles par l'expérience. Plus particulièrement, l'objectif serait de déterminer quelles conditions conduisent à une implosion de bulle la plus néfaste pour le mur de façon à mieux comprendre l'origine des dégâts causés par la cavitation.

Enfin, il existe différentes méthodes numériques permettant de modéliser un mur ou une paroi déformable avec une impédance finie. Par exemple, la méthode proposée par Kobayashi *et al.* [57] repose sur le principe que l'écoulement est composé de trois fluides dont une interface est située entre les deux fluides constituant le milieu diphasique étudié et l'autre interface est la paroi entre l'écoulement et le milieu quasi solide. Les trois composants de l'écoulement sont décrits par l'équation d'état raidie dont le paramètre de raidissement (B) est d'autant plus élevé que le matériau est rigide. Cette méthode permettrait donc de considérer un cas plus réaliste d'implosion d'une bulle à proximité d'un calcul rénal ou d'une cellule du corps humain.

A Annexes

A.1 Coefficients des schémas numériques

Dans cette annexe les coefficients des schémas numériques utilisés au cours de cette étude sont donnés.

Les coefficients des schémas aux différences finies centrées standard et optimisé sont donnés dans le tableau A.1. Les coefficients du filtre d'ordre 6 utilisé pour le filtrage des oscillations maille-à-maille sont rassemblés dans le tableau A.2. Enfin, les coefficients des algorithmes de Runge-Kutta standard en 4 étapes et optimisé en 6 étapes sont détaillés dans le tableau A.3.

	optimisé d'ordre 4	standard d'ordre 10
a_1	0.872756993962	5/6
a_2	-0.286511173973	-5/21
a_3	0.090320001280	5/84
a_4	-0.020779405824	-5/504
a_5	0.002484594688	1/1260

TABLEAU A.1 – Coefficients des schémas aux différences finies centrées sur 11 points d'ordre 4 et d'ordre 10.

d_0	0.234810479761700
d_1	-0.199250131285813
d_2	0.120198310245186
d_3	-0.049303775636020
d_4	0.012396449873964
d_5	-0.001446093078167

TABLEAU A.2 – Coefficients du filtre sélectif d'ordre 6 centré sur 11 points.

	optimisé 6 étapes	standard 4 étapes
γ_1	1	1
γ_2	1/2	1/2
γ_3	0.165919771368	1/6
γ_4	0.040919732041	1/24
γ_5	0.007555704391	
γ_6	0.000891421261	

TABLEAU A.3 – Coefficients des algorithmes de Runge-Kutta optimisé en 6 étapes et standard en 4 étapes.

A.2 Estimation des coefficients λ , μ , μ_v et β de l'air, de l'hélium, du SF6, du R22 et de l'eau

Les conductivités thermiques λ , les viscosité dynamiques μ et viscosités de volume μ_v ainsi que les coefficients de dilatation thermique β des liquides et des gaz varient avec la température. Ces quantités sont estimées à chaque itération pour chacun des fluides à l'aide de relations empiriques détaillées dans cette annexe. Les gammes de températures pour lesquelles ces relations ont été choisies correspondent aux températures observées au sein des écoulements étudiés. Pour la simulation de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov dans le chapitre 5.1, la température de l'air est comprise entre 296 K et 1400 K, et la température du SF6 entre 296 K et 318 K. Pour les simulations des bulles cylindriques d'hélium et de R22 dans le chapitre 5.2, les températures sont comprises entre 293 K et 350 K. L'influence de la pression sur les propriétés des fluides est négligée dans cette étude.

A.2.1 Viscosités dynamiques μ et viscosités de volume μ_v

L'équation de Sutherland est utilisée afin de déterminer les viscosités dynamiques de l'air, l'hexafluorure de soufre (SF6), l'hélium (He) et le chlorodifluorométhane (R22). Elle s'écrit

$$\mu = \mu(T_0) \times \frac{(T_0 + S)}{(T + S)} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{(3/2)} \quad (\text{A.1})$$

où $\mu(T_0)$ est la viscosité dynamique à la température T_0 et S est une constante. Les constantes utiles au calcul de la viscosité dynamique des quatre gaz considérés dans cette étude sont rassemblées dans le tableau A.4.

Sur la figure A.1, les viscosités dynamiques obtenues à l'aide de l'équation de Sutherland sont comparées aux données expérimentales pour chacun des gaz [3, 37, 38, 50, 54, 112]. À pression ambiante et pour les températures rencontrées au sein des écoulements simulés, la

	$\mu(T_0)$ (kg.m ⁻¹ .s ⁻¹)	T_0 (K)	S (K)
Air	1.716×10^{-5}	273	130
SF6	1.4×10^{-5}	273	227
He	1.87×10^{-5}	273	65
R22	1.289×10^{-5}	300.5	310

TABLEAU A.4 – Constantes nécessaires aux calculs des viscosités dynamiques à l'aide de l'équation de Sutherland (A.1) pour l'air, le SF6, l'hélium et le R22.

loi de Sutherland prédit avec précision la viscosité dynamique des quatre gaz.

L'évolution de la viscosité dynamique de l'eau en fonction de la température est déterminée à partir des données expérimentales [7]. Elle s'écrit :

$$\mu_{H_2O} = 17.31 \exp(-0.03476T) + 1.464 \times 10^{-3} \exp(-0.004714T). \quad (A.2)$$

Elle est tracée en pointillés noirs sur la figure A.2. Elle est comparée aux données expérimentales pour des pressions telles que $p = 1, 5, 10, 25, 50, 100, 200$ et 500 bar. Les isobares représentées en gris sont très similaires indiquant que l'influence de la pression sur la viscosité dynamique de l'eau est négligeable.

Lorsque la viscosité dynamique est largement supérieure à la viscosité de volume, l'hypothèse de Stokes est vérifiée, soit $\mu_v/\mu \ll 1$. Cette hypothèse est vraie pour des gaz monoatomiques. Par conséquent, la viscosité de volume de l'hélium est négligée. En revanche, cette hypothèse ne peut être appliquée pour des gaz diatomiques ou des liquides. Leurs viscosités de volume sont non négligeables et ont un effet notable sur l'amortissement des ondes de pression ainsi que sur l'épaisseur des ondes de choc [26]. Afin de tenir compte de cette propriété du fluide, les viscosités de volume de l'air $\mu_{v_{air}}$, du SF6 $\mu_{v_{SF6}}$ et de l'eau $\mu_{v_{H_2O}}$ sont estimées en fonction de la température à chaque itération. Pour l'air, la viscosité de volume est évaluée grâce à la relation proposée par Rossing [84] :

$$\mu_{v_{air}} = 0.6\mu_{air}, \quad (A.3)$$

où μ_{air} est la viscosité dynamique de l'air calculée à l'aide de l'équation de Sutherland (A.1). L'évolution de la viscosité de volume du SF6 en fonction de la température est prédite par la loi empirique proposée par Cramer [21], s'écrivant

$$\mu_{v_{SF6}} = 7.54 \times 10^{-5} \left(0.2064(\gamma_{SF6} - 1)^2 \exp \left(\frac{121}{T^{1/3}} - \frac{339}{T^{2/3}} \right) \right). \quad (A.4)$$

Enfin, la viscosité de volume de l'eau $\mu_{v_{H_2O}}$ est calculée en utilisant la relation proposée par

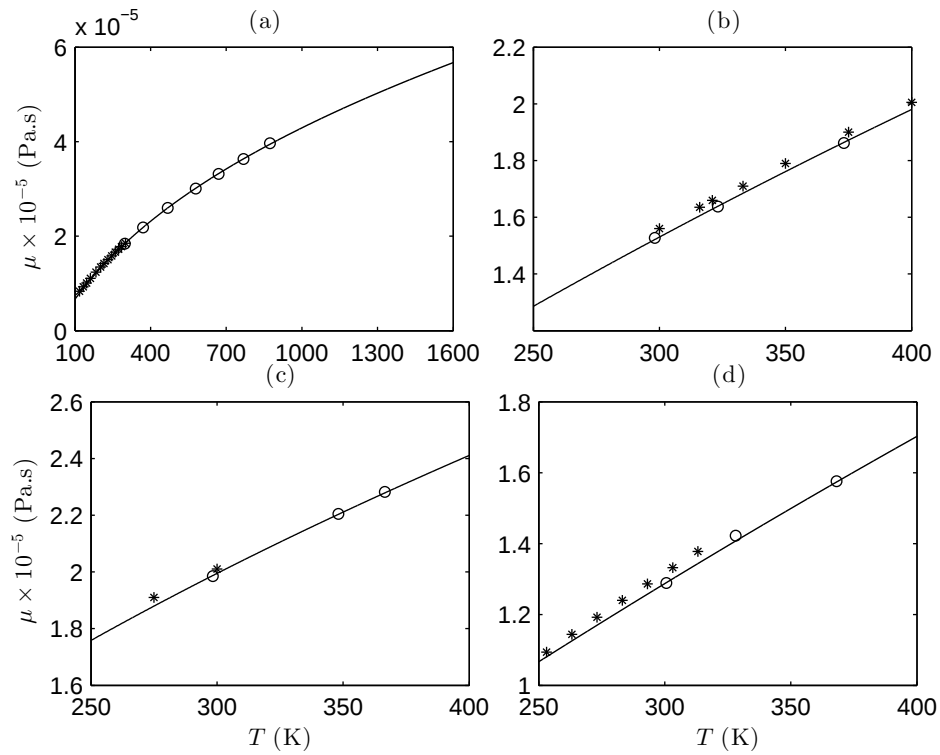


FIGURE A.1 – Représentation des variations de la viscosité dynamique μ , définie par la loi de Sutherland (A.1), en fonction de la température, pour (a) l'air, (b) le SF6, (c) l'hélium et (d) le R22. Données expérimentales pour l'air $\circ$ [38] et $*$ [50] pour le SF6 $\circ$ [37] et $*$ [112] pour l'hélium $\circ$ [54] et $*$ [3], et pour le R22 $\circ$ [55] et $*$ [52].

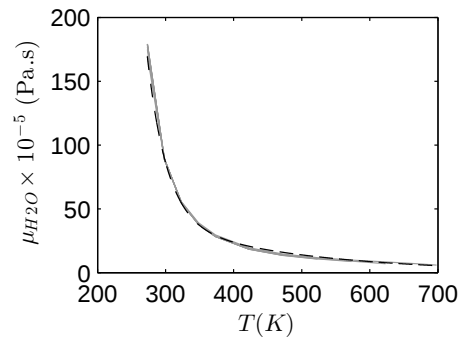


FIGURE A.2 – Représentation des variations de la viscosité dynamique de l'eau μ_{H_2O} calculée à l'aide de la relation (A.2), en fonction de la température ; — données expérimentales [7].

Rossing [84], telle que

$$\mu_{v_{H_2O}} = 3\mu_{H_2O}, \quad (\text{A.5})$$

où μ_{H_2O} est la viscosité dynamique de l'eau obtenue à l'aide de l'équation (A.2). Aucune information n'a été trouvée au sujet de la viscosité de volume du R22. Par conséquent, celle-ci est arbitrairement fixée à zéro.

A.2.2 Conductivités thermiques λ

Les conductivités thermiques de l'air, du SF6, de l'hélium, du R22 et de l'eau sont aussi évaluées en fonction de la température à chaque itération. La conductivité thermique de l'air λ_{air} est calculée à partir de l'expression

$$\lambda_{air} = \frac{\mu_{air} c_{p,air}}{Pr}, \quad (\text{A.6})$$

où $Pr = 0.7$ est le nombre de Prandtl et $c_{p,air} = \gamma_{air} c_{v,air}$ est la capacité calorifique de l'air à pression constante, estimée à partir de la capacité calorifique de l'air à volume constant $c_{v,air} = 717.5 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et du rapport des capacités calorifiques $\gamma_{air} = 1.4$.

Un polynôme d'ordre 2 déterminé à l'aide des mesures expérimentales de Uribe *et al.* [110] permet d'évaluer la conductivité thermique du SF6 λ_{SF6} en fonction de la température. Il s'exprime comme

$$\lambda_{SF6} = -7.3447 \times 10^{-8} T^2 + 1.2882 \times 10^{-4} T - 1.9136 \times 10^{-2}. \quad (\text{A.7})$$

La conductivité thermique de l'hélium λ_{He} est déterminée à l'aide d'un polynôme d'ordre 3 obtenu à partir des données expérimentales de Reid *et al.* [82] :

$$\lambda_{He} = 1.29 \times 10^{-11} T^3 - 7.45 \times 10^{-8} T^2 + 3.896 \times 10^{-4} T + 3.722 \times 10^{-2}. \quad (\text{A.8})$$

Enfin, la conductivité thermique du R22 λ_{R22} est calculée à l'aide d'une approximation linéaire des mesures de Kandlikar *et al.* [52], s'écrivant

$$\lambda_{R22} = 6.227 \times 10^{-5} T - 7.6001 \times 10^{-3}. \quad (\text{A.9})$$

Les variations des conductivités thermiques en fonction de la température obtenues pour l'air, le SF6, l'hélium et le R22 à l'aide des équations (A.6), (A.7), (A.8) et (A.9), respectivement, sont représentées en trait continu sur les figures A.3(a-d). Elles sont comparées à des données expérimentales [3, 37, 38].

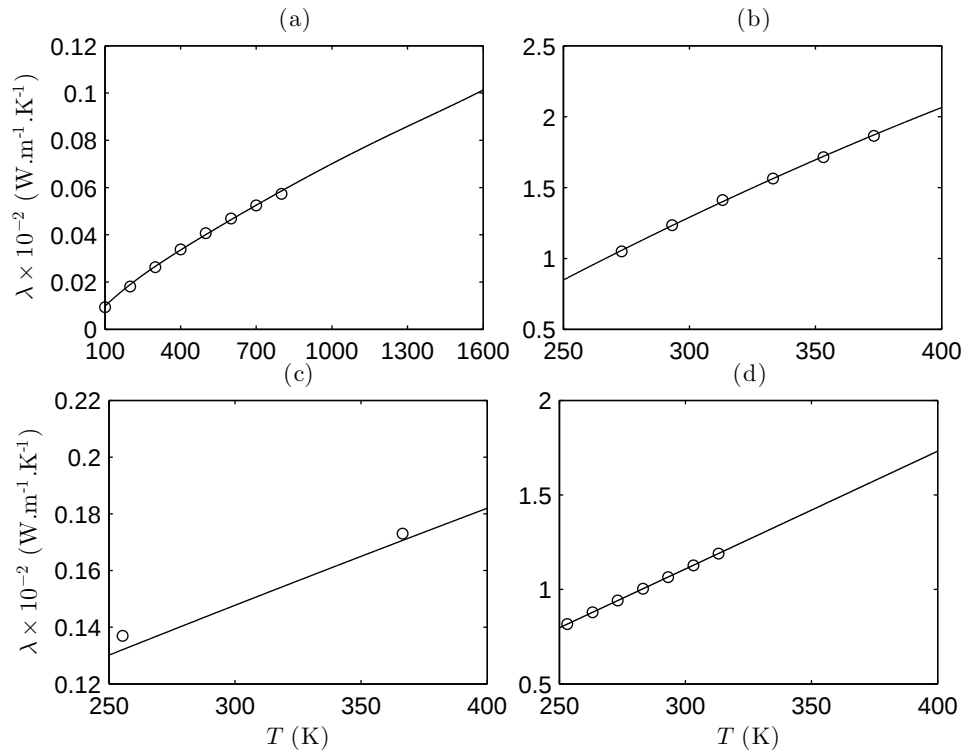


FIGURE A.3 – Représentation des variations des coefficients de conductivité thermique en fonction de la température obtenus à l’aide des relations (A.6), (A.7), (A.8) et (A.9) pour (a) l’air, (b) le SF6, (c) l’hélium et (d) le R22; $\circ$ données expérimentales [3, 37, 38].

La conductivité thermique de l'eau est déterminée de la façon suivante :

$$\lambda_{H_2O} = 0.597 + 0.0017(T - 300) - 7.5 \times 10^{-6}(T - 300)^2, \quad (\text{A.10})$$

à partir des travaux expérimentaux de Beaton [7]. Les variations de la conductivité sont présentées sur la figure A.4, et comparées aux données expérimentales obtenues pour des pressions allant de 1 à 500 bar. La flèche indique l'ordre des isobares pour une pression p croissante, telle que $p = 1, 5, 10, 25, 50, 100, 200$ et 500 bar.

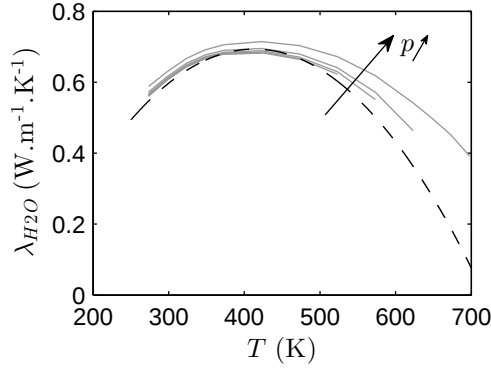


FIGURE A.4 – Représentation des variations du coefficient de conductivité thermique de l'eau λ_{H_2O} en fonction de la température obtenues à l'aide de la relation (A.10); — données expérimentales pour des pressions $p = 1, 5, 10, 25, 50, 100, 200$ et 500 bar [7].

A.2.3 Dilatations thermiques β

Le coefficient de dilatation thermique est utile au calcul de la température lors de la résolution de l'équation (2.46). Il est défini par l'expression

$$\beta = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p. \quad (\text{A.11})$$

A l'aide de la relation des gaz parfaits, le coefficient β est le même pour l'ensemble des gaz parfaits. Il s'écrit :

$$\beta = \frac{1}{T}. \quad (\text{A.12})$$

Le coefficient de dilatation thermique de l'eau β_{H_2O} est estimé à partir des données expérimentales de Beaton [7]. Il est exprimé de la façon suivante :

$$\beta_{H_2O} = 3.446 \times 10^3 \exp(5.505 \times 10^{-4}T) + 3.153 \times 10^{-12} \exp(0.05593T), \quad (\text{A.13})$$

Les variations de β_{H_2O} sont comparées aux données expérimentales obtenues pour neuf valeurs de pression allant de 1 à 500 bar sur la figure A.5. La flèche indique l'ordre des isobares pour une pression p croissante, soit $p = 1, 5, 10, 25, 50, 100, 200$ et 500 bar [7].

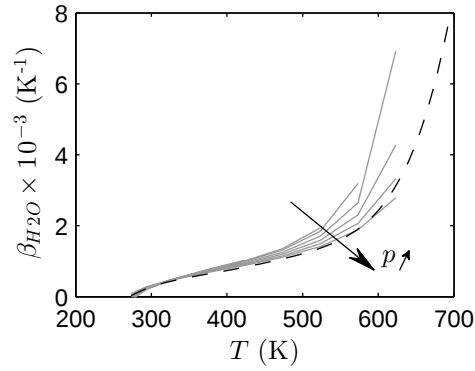


FIGURE A.5 – Représentation des variations du coefficient de dilatation thermique de l'eau β_{H_2O} en fonction de la température obtenues à l'aide de la relation (A.13) ; — données expérimentales pour des pressions $p = 1, 5, 10, 25, 50, 100, 200$ et 500 bar [7].

Bibliographie

- [1] R. Abgrall. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : A quasi conservative approach. *Journal of computational physics*, 125 :150–160, 1996.
- [2] R. Abgrall and S. Karni. Computations of compressible multifluids. *Journal of computational physics*, 169(2) :594–623, 2001.
- [3] S.W. Akin. Thermodynamic properties of helium. *Trans. ASME*, 72 :751–757, 1950.
- [4] G. Allaire, S. Clerc, and S. Kokh. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *Journal of Computational Physics*, 181(2) :577–616, 2002.
- [5] J.D. Anderson. *Modern compressible flow : with historical perspective*, volume 12. McGraw-Hill New York, 1990.
- [6] G. K. Batchelor. An introduction to fluid dynamics, 2000.
- [7] C.F. Beaton. *Heat Exchanger design handbook : Properties of saturated fluids*. Begell, 2002.
- [8] S.A. Beig and E. Johnsen. Maintaining interface equilibrium conditions in compressible multiphase flows using interface capturing. *Journal of Computational Physics*, 302 :548–566, 2015.
- [9] C. Bogey and C. Bailly. A family of low dispersive and low dissipative explicit schemes for flow and noise computations. *Journal of computational physics*, 194 :194–214, 2004.
- [10] C. Bogey, N. De Cacqueray, and C. Bailly. A shock-capturing methodology based on adaptive spatial filtering for high-order non-linear computations. *Journal of computational physics*, 228 :1447–1465, 2009.
- [11] C. Bogey and R. Gojon. Feedback loop and upwind-propagating waves in ideally expanded supersonic impinging round jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 823 :562–591, 2017.
- [12] C. Bogey, O. Marsden, and C. Bailly. Large-eddy simulation of the flow and acoustic fields of a Reynolds number 10^5 subsonic jet with tripped exit boundary layers. *Physics of Fluids*, 23(3) :035104, 2011.

- [13] C. Bogey, O. Marsden, and C. Bailly. Effects of moderate Reynolds numbers on subsonic round jets with highly disturbed nozzle-exit boundary layers. *Physics of Fluids*, 24(10) :105107, 2012.
- [14] M. Brouillette. The Richtmyer-Meshkov instability. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 34(1) :445–468, 2002.
- [15] J.L. Bull. The application of microbubbles for targeted drug delivery. *Expert opinion on drug delivery*, 4(5) :475–493, 2007.
- [16] E. Can and A. Prosperetti. A level set method for vapor bubble dynamics. *Journal of computational physics*, 231(4) :1533–1552, 2012.
- [17] R.B. Chapman and M.S. Plesset. Thermal effects in the free oscillation of gas bubbles. *Journal of Basic Engineering*, 93(3) :373–376, 1971.
- [18] S. Clerc. Numerical simulation of the homogeneous equilibrium model for two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 161(1) :354–375, 2000.
- [19] B.D. Collins and J.W. Jacobs. PLIF flow visualization and measurements of the Richtmyer–Meshkov instability of an air/SF6 interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 464, 2002.
- [20] V. Coralic and T. Colonius. Finite-volume WENO scheme for viscous compressible multicomponent flows. *Journal of computational physics*, 274 :95–121, 2014.
- [21] M.S. Cramer. Numerical estimates for the bulk viscosity of ideal gases. *Physic of Fluids*, 24, 2012.
- [22] B.J. Daly. Numerical study of two fluid Rayleigh-Taylor instability. *The Physics of Fluids*, 10(2) :297–307, 1967.
- [23] B.J. Daly. A technique for including surface tension effects in hydrodynamic calculations. *Journal of Computational Physics*, 4(1) :97–117, 1969.
- [24] F. Daude, P. Galon, Z. Gao, and E. Blaud. Numerical experiments using a HLLC-type scheme with ALE formulation for compressible two-phase flows five-equation models with phase transition. *Computers & Fluids*, 94 :112–138, 2014.
- [25] N. de Cacqueray, C. Bogey, and C. Bailly. Investigation of a high-mach-number overexpanded jet using large-eddy simulation. *AIAA Journal*, 49(10) :2171–2182, 2011.
- [26] G. Emanuel and B.M. Argrow. Linear dependence of the bulk viscosity on shock wave thickness. *Physics of Fluids (1994-present)*, 6(9) :3203–3205, 1994.

-
- [27] J Fukai, Z Zhao, Dimos Poulidakos, Constantine M Megaridis, and O Miyatake. Modeling of the deformation of a liquid droplet impinging upon a flat surface. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 5(11) :2588–2599, 1993.
- [28] J. Giordano and Y. Burtshell. Richtmyer-Meshkov instability induced by shock-bubble interaction : numerical and analytical studies with experimental validation. *Physics of Fluids*, 18(3) :036102, 2006.
- [29] J. Glimm, E. Isaacson, D. Marchesin, and O. McBryan. Front tracking for hyperbolic systems. *Advances in Applied Mathematics*, 2(1) :91–119, 1981.
- [30] R. Gojon, C. Bogey, and O. Marsden. Investigation of tone generation in ideally expanded supersonic planar impinging jets using large-eddy simulation. *Journal of Fluid Mechanics*, 808 :90–115, 2016.
- [31] V.N. Goncharov. Analytical model of nonlinear, single-mode, classical Rayleigh-Taylor instability at arbitrary Atwood numbers. *Physical review letters*, 88(13) :134502, 2002.
- [32] J-F. Haas. *Interaction of weak shock waves and discrete gas inhomogeneities*. PhD thesis, California Institute of Technology, 1984.
- [33] J-F. Haas and B. Sturtevant. Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities. *Journal of Fluid Mechanics*, 181 :41–76, 1987.
- [34] F.H. Harlow and J.E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The physics of fluids*, 8(12) :2182–2189, 1965.
- [35] N.A. Hawker and Y. Ventikos. Interaction of a strong shockwave with a gas bubble in a liquid medium : a numerical study. *Journal of Fluid Mechanics*, 701 :59–97, 2012.
- [36] B. Hejiazialhosseini, D. Rossinelli, M. Bergdorf, and P. Koumoutsakos. High order finite volume methods on wavelet-adapted grids with local time-stepping on multicore architectures for the simulation of shock-bubble interactions. *Journal of Computational Physics*, 229(22) :8364–8383, 2010.
- [37] J.M. Hellemans, J. Kestin, and S.T. Ro. The viscosity of CH₄, CF₄ and SF₆ over a range of temperatures. *Physica*, 65(2) :376–380, 1973.
- [38] J.M. Hellemans, J. Kestin, and S.T. Ro. The viscosity of oxygen and of some of its mixtures with other gases. *Physica*, 65(2) :362–375, 1973.
- [39] M. Herrmann, P. Moin, and S.I. Abarzhi. Nonlinear evolution of the Richtmyer-Meshkov instability. *Journal of Fluid Mechanics*, 612 :311–338, 2008.

- [40] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39(1) :201–225, 1981.
- [41] M. Ishii. Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow. *Eyrolles, Paris*, 1975.
- [42] J.W. Jacobs and V.V. Krivets. Experiments on the late-time development of single-mode Richtmyer-Meshkov instability. *Physics of Fluids*, 034105, 2005.
- [43] J.W. Jacobs and V.V. Krivets. Personal communication.
- [44] A. Jafari and N. Ashgriz. Numerical techniques for free surface flows : Interface capturing and interface tracking. *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*, pages 2458–2479, 2015.
- [45] A. Jameson, W. Schmidt, E. Turkel, et al. Numerical solutions of the Euler equations by finite volume methods using Runge-Kutta time-stepping schemes. *AIAA paper*, 1259 :1981, 1981.
- [46] G.-S. Jiang and C.-W. Shu. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *Journal of computational physics*, 126(1) :202–228, 1996.
- [47] E. Johnsen and T. Colonius. Implementation of WENO schemes in compressible multicomponent flow problems. *Journal of computational physics*, 219 :715–732, 2006.
- [48] E. Johnsen and T. Colonius. Numerical simulations of non-spherical bubble collapse. *Journal of Fluid Mechanics*, 629 :231–262, 2009.
- [49] E. Johnsen and F. Ham. Preventing numerical errors generated by interface-capturing schemes in compressible multi-material flows. *Journal of Computational Physics*, 231(17) :5705–5717, 2012.
- [50] H.L. Johnston and K.E. McCloskey. Viscosities of several common gases between 90 K and room temperature. *The Journal of Physical Chemistry*, 44(9) :1038–1058, 1940.
- [51] S. Jolgam, A. Ballil, A. Nowakowski, and F. Nicolleau. On equations of state for simulations of multiphase flows. In *World Congress on Engineering 2012. July 4-6, 2012. London, UK.*, volume 3, pages 1963–1968. International Association of Engineers, 2012.
- [52] S. Kandlikar, C. Bijlani, and S. Sukhatme. Predicting the properties of mixtures of R22 and R12 part II-transport properties. *American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers (ASHRAE)*, (2343), 1975.
- [53] S. Karni. Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm. *Journal of computational physics*, 112 :31–43, 1994.
- [54] J. Kestin and W. Leidenfrost. The viscosity of helium. *Physica*, 25(1-6) :537–555, 1959.

-
- [55] J. Kestin and W.A. Wakeham. The viscosity of three polar gases. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 83(6) :573–576, 1979.
- [56] J.W. Kim and D.J. Lee. Adaptive nonlinear artificial dissipation model for computational aeroacoustics. *AIAA journal*, 39(5) :810–818, 2001.
- [57] K. Kobayashi, T. Kodama, and H. Takahira. Shock wave-bubble interaction near soft and rigid boundaries during lithotripsy : numerical analysis by the improved ghost fluid method. *Physics in Medicine & Biology*, 56(19) :6421, 2011.
- [58] D.B. Kothe, R.C. Mjolsness, and M.D. Torrey. *RIPPLE : a computer program for incompressible flows with free surfaces*. Available to DOE and DOE contractors from OSTI, 1991.
- [59] F. Kremer and C. Bogey. Large-eddy simulation of turbulent channel flow using relaxation filtering : Resolution requirement and reynolds number effects. *Computers & Fluids*, 116 :17–28, 2015.
- [60] M. Latini, O. Schilling, and W.S. Don. Effects of WENO flux reconstruction order and spatial resolution on reshocked two-dimensional Richtmyer-Meshkov instability. *Journal of Computational Physics*, 221(2) :805–836, 2007.
- [61] W. Lauterborn and H. Bolle. Experimental investigations of cavitation-bubble collapse in the neighbourhood of a solid boundary. *Journal of Fluid Mechanics*, 72(2) :391–399, 1975.
- [62] G. Layes, G. Jourdan, and L. Houas. Experimental study on a plane shock wave accelerating a gas bubble. *Physics of Fluids*, 21(7) :074102, 2009.
- [63] O. Le Métayer, J. Massoni, and R. Saurel. Élaboration des lois d’état d’un liquide et de sa vapeur pour les modèles d’écoulements diphasiques. *International journal of thermal sciences*, 43(3) :265–276, 2004.
- [64] R.J. LeVeque. *Finite volume methods for hyperbolic problems*, volume 31. Cambridge university press, 2002.
- [65] O. Lindau and W. Lauterborn. Cinematographic observation of the collapse and rebound of a laser-produced cavitation bubble near a wall. *Journal of Fluid Mechanics*, 479 :327–348, 2003.
- [66] O. Marsden, C. Bogey, and C. Bailly. A study of infrasound propagation based on high-order finite difference solutions of the Navier-Stokes equations. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 135(3) :1083–1095, 2014.

- [67] J. Massoni, R. Saurel, B. Nkonga, R. Abgrall, et al. Some models and Eulerian methods for interface problems between compressible fluids with heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(6) :1287–1307, 2002.
- [68] V. Minsier, J. De Wilde, and J. Proost. Simulation of the effect of viscosity on jet penetration into a single cavitating bubble. *Journal of Applied Physics*, 106(8) :084906, 2009.
- [69] S. Nagrath, K. Jansen, R.T. Lahey, and I. Akhatov. Hydrodynamic simulation of air bubble implosion using a level set approach. *Journal of Computational Physics*, 215(1) :98–132, 2006.
- [70] V.-T. Nguyen, J. Peraire, B.C. Khoo, and P.-O. Persson. A discontinuous galerkin front tracking method for two-phase flows with surface tension. *Computers & Fluids*, 39(1) :1–14, 2010.
- [71] W.F. Noh and P. Woodward. Slic (simple line interface calculation). In *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28–July 2, 1976 Twente University, Enschede*, pages 330–340. Springer, 1976.
- [72] C-D. Ohl and R. Ikink. Shock-wave-induced jetting of micron-size bubbles. *Physical review letters*, 90(21) :214502, 2003.
- [73] C-D. Ohl, T. Kurz, R. Lindau O. Geisler, and W. Lauterborn. Bubble dynamics, shock waves and sonoluminescence. *The Royal Society*, 357 :269–294, 1999.
- [74] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics*, 79(1) :12–49, 1988.
- [75] C.S. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of computational physics*, 25(3) :220–252, 1977.
- [76] B.J. Plohr. Shockless acceleration of thin plates modeled by a tracked random choice method. *AIAA journal*, 26(4) :470–478, 1988.
- [77] S. Popinet and S. Zaleski. Bubble collapse near a solid boundary : a numerical study of the influence of viscosity. *Journal of Fluid Mechanics*, 464 :137–163, 2002.
- [78] J.J. Quirk and S. Karni. On the dynamics of a shock–bubble interaction. *Journal of Fluid Mechanics*, 318 :129–163, 1996.
- [79] D. Ranjan, J. Oakley, and R. Bonazza. Shock-bubble interactions. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 43 :117–140, 2011.

-
- [80] Lord Rayleigh. Viii. on the pressure developed in a liquid during the collapse of a spherical cavity. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 34(200) :94–98, 1917.
- [81] F. Raymond and J.-M. Rosant. A numerical and experimental study of the terminal velocity and shape of bubbles in viscous liquids. *Chemical Engineering Science*, 55(5) :943–955, 2000.
- [82] R.C. Reid, J.M. Prausnitz, and B.E. Poling. *The properties of gases and liquids*. McGraw Hill Book Co., New York, NY, 1987.
- [83] R.D. Richtmyer. Taylor instability in shock acceleration of compressible fluids. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 13(2) :297–319, 1960.
- [84] T.D. Rossing. *Springer Handbook of Acoustics*. Springer, 2007.
- [85] M. Rudman. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. *International journal for numerical methods in fluids*, 24(7) :671–691, 1997.
- [86] O. Sadot, L. Erez, U. Alon, D. Oron, L.A. Levin, G. Erez, G. Ben-Dor, and D. Shvarts. Study of nonlinear evolution of single-mode and two-bubble interaction under Richtmyer-Meshkov instability. *Physical review letters*, 80(8) :1654, 1998.
- [87] S.K. Sambasivan and H.S. Udaykumar. Ghost fluid method for strong shock interactions part 1 : Fluid-fluid interfaces. *Aiaa Journal*, 47(12) :2907–2922, 2009.
- [88] R. Saurel and R. Abgrall. A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2) :425–467, 1999.
- [89] R. Saurel, P. Bovin, and O. Le Metayer. A general formulation for cavitating, boiling and evaporating flows. *Computers and Fluids*, 128 :53–64, 2016.
- [90] S.J. Shaw, Y.H. Jin, W.P. Schiffrers, and D.C. Emmony. The interaction of a single laser-generated cavity in water with a solid surface. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 99(5) :2811–2824, 1996.
- [91] S.J. Shaw and P.D. Spelt. Shock emission from collapsing gas bubbles. *Journal of Fluid Mechanics*, 646 :363–373, 2009.
- [92] C.-W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 77(2) :439–471, 1988.
- [93] C.-W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, ii. *Journal of Computational Physics*, 83(1) :32–78, 1989.
- [94] K-M. Shyue. An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems. *Journal of computational physics*, 142 :208–242, 1998.

- [95] K.K. So, X.Y. Hu, and N.A. Adams. Anti-diffusion interface sharpening technique for two-phase compressible flow simulations. *Journal of Computational Physics*, 231(11) :4304–4323, 2012.
- [96] Z. Solomenko, P.D.M. Spelt, L.Ó. Náraigh, and P. Alix. Mass conservation and reduction of parasitic interfacial waves in level-set methods for the numerical simulation of two-phase flows : a comparative study. *International Journal of Multiphase Flow*, (95) :235–256, 2017.
- [97] B.D. Storey and A.J. Szeri. Water vapour, sonoluminescence and sonochemistry. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 456(1999) :1685–1709, 2000.
- [98] M. Sussman, A.S. Almgren, J.B. Bell, P. Colella, L.H. Howell, and M.L. Welcome. An adaptive level set approach for incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 148(1) :81–124, 1999.
- [99] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational physics*, 114(1) :146–159, 1994.
- [100] P.K. Sweby. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM journal on numerical analysis*, 21(5) :995–1011, 1984.
- [101] C.K.W. Tam. Benchmark problems and solutions. *NASA STI/Recon Technical Report N*, 95 :30134, 1995.
- [102] C.K.W. Tam and Z. Dong. Radiation and outflow boundary conditions for direct computation of acoustic and flow disturbances in a non uniform mean flow. *Journal of Computational Acoustics*, 4 :175–201, 1996.
- [103] C.K.W. Tam and H. Shen. Direct computation of nonlinear acoustic pulses using high-order finite difference schemes. *AIAA paper*, 4325 :1993, 1993.
- [104] A-K. Tornberg and B. Engquist. A finite element based level-set method for multiphase flow applications. *Computing and Visualization in Science*, 3(1-2) :93–101, 2000.
- [105] V.K. Tritschler, X.Y. Hu, S. Hickel, and N.A. Adams. Numerical simulation of a Richtmyer-Meshkov instability with an adaptive central-upwind sixth-order WENO scheme. *Physica Scripta*, 2013(T155) :014016, 2013.
- [106] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y-J. Jan. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2) :708–759, 2001.

- [107] G. Tryggvason, R. Scardovelli, and S. Zaleski. *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge University Press, 2011.
- [108] C.K. Turangan, A.R. Jamaluddin, G.J. Ball, and T.G. Leighton. Free-lagrange simulations of the expansion and jetting collapse of air bubbles in water. *Journal of Fluid Mechanics*, 598 :1–25, 2008.
- [109] S.O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of computational physics*, 100(1) :25–37, 1992.
- [110] F.J. Uribe, E.A. Mason, and J. Kestin. Thermal conductivity of nine polyatomic gases at low density. *Journal of physical and chemical reference data*, 19(5) :1123–1136, 1990.
- [111] K. Voronetska. *Simulation numérique directe des écoulements à phases dispersées*. PhD thesis, Bordeaux 1, 2012.
- [112] J. Wilhelm, D. Seibt, E. Bich, E. Vogel, and E. Hassel. Viscosity measurements on gaseous sulfur hexafluoride. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 50(3) :896–906, 2005.
- [113] H.C. Yee. Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications. *Journal of Computational Physics*, 68(1) :151–179, 1987.
- [114] D.L. Youngs. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics*, 1982.
- [115] S. Zhang, J.H. Duncan, and G.L. Chahine. The final stage of the collapse of a cavitation bubble near a rigid wall. *Journal of Fluid Mechanics*, 257 :147–181, 1993.

Liste des publications

- Simulation numérique d'écoulements diphasiques compressibles à l'aide de différences finies centrées d'ordre élevé, M. Capuano, C. Bogey and P.D.M. Spelt, *Congrès Français de Mécanique*, 1-5, Lyon, 24-28 Août 2015.
- Numerical simulations of viscous and compressible two-phase flows using high-order schemes, M. Capuano, C. Bogey and P.D.M. Spelt, *International Conference on Multiphase Flow*, 1-6, Firenze, May 22nd-27th 2016.
- Viscous simulations of shock-bubble interaction and Richtmyer-Meshkov instability, M. Capuano, C. Bogey and P.D.M. Spelt, *Congrès Français de Mécanique*, 1-7, Lille, 28 Août-1er Septembre 2017.
- Simulations of viscous and compressible gas-gas flows using high-order finite difference schemes, M. Capuano, C. Bogey and P.D.M. Spelt, *Journal of Computational Physics*, 351, 56-81, 2018, <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.01.047>.

AUTORISATION DE SOUTENANCE

Vu les dispositions de l'arrêté du 25 mai 2016,

Vu la demande du directeur de thèse

Monsieur C. BOGEY

et les rapports de

M. R. ABGRALL

Professeur - Institut für Mathematik & Computational Science - Universität Zürich -
Winterthurerstrasse 190 - CH-8057 Zürich - Suisse

et de

M. E. JOHNSEN

Associate Professor - University of Michigan 2015 AL (W.E. Lay Auto Lab) - 1231 Beal, Ann
Arbor - MI 48109-2133 - USA

Madame CAPUANO Marion

est autorisée à soutenir une thèse pour l'obtention du grade de **DOCTEUR**

Ecole doctorale MECANIQUE, ENERGETIQUE, GENIE CIVIL ET ACOUSTIQUE

Fait à Ecully, le 26 juin 2018

P/Le directeur de l'E.C.L.
La directrice des Etudes

