



HAL
open science

Simulation numérique directe de l'impact de SLD (Supercooled Large Droplet) sur une paroi

Thibault Xavier

► **To cite this version:**

Thibault Xavier. Simulation numérique directe de l'impact de SLD (Supercooled Large Droplet) sur une paroi. Sciences de l'ingénieur [physics]. UNIVERSITE DE TOULOUSE, 2020. Français. NNT : . tel-02890265

HAL Id: tel-02890265

<https://hal.science/tel-02890265>

Submitted on 6 Jul 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



THÈSE

En vue de l'obtention du
DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE
Délivré par l'Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace

Présentée et soutenue par
Thibault XAVIER

Le 17 février 2020

Simulation numérique directe de l'impact de SLD (Supercooled Large Droplet) sur une paroi

Ecole doctorale : **MEGEP - Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés**

Spécialité : **Dynamique des fluides**

Unité de recherche :
Energétique et Dynamique des Fluides

Thèse dirigée par
Jean-Luc ESTIVALEZES et Davide ZUZIO

Jury

M. Alain BERLEMONT, Rapporteur
M. David LE TOUZE, Rapporteur
M. Sébastien TANGUY, Examineur
M. Stéphane VINCENT, Examineur
Mme Lisl WEYNANS, Examinatrice
M. Jean-Luc ESTIVALEZES, Directeur de thèse
M. Davide ZUZIO, Co-directeur de thèse
M. Christophe JOSSERAND, Président

ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

Résumé

La lutte contre la formation de givre en vol est un enjeu majeur en aéronautique en tant que source majeure d'accidents. Lors de la collision avec les gouttes d'eau surfondue présentes dans les nuages, l'accrétion de givre engendrée peut détériorer les performances aérodynamiques de l'appareil ou obstruer les capteurs. Dans ce contexte, la compréhension détaillée du processus d'impact de goutte est encouragée par l'évolution des normes de certification pour adapter les dispositifs de protection. L'utilisation d'un outil de simulation numérique directe (DNS) permet d'accéder à des grandeurs physiques difficilement accessibles par l'expérience et de fournir des données pour la modélisation. Néanmoins, les impacts à haute vitesse demandent des méthodes numériques à la fois précises, conservatives et robustes tout en exigeant un coût de simulation élevé. Dans cette thèse, on contribue à la compréhension de la physique de l'impact de goutte à basse et haute vitesse sur différents types de cible, parois sèche ou mouillée. Ceci est fait à travers le développement et l'utilisation du code DNS DYJEAT, qui résout les équations de Navier-Stokes incompressibles diphasiques. Une approche centrée sur les méthodes Level-Set et Volume-of-Fluid permettent de répondre aux défis de ce type de simulation. À l'aide de ce code, on étudie d'abord le phénomène d'étalement en implémentant une modélisation des effets capillaires en paroi. On s'intéresse par la suite à la formation d'une couronne liquide lors d'un impact sur une épaisseur liquide. L'instrumentation du code réalisée permet de caractériser finement la couronne et les structures secondaires formées lors de l'impact. À partir du post-traitement d'expériences à haute vitesse menées à l'ONERA, on a réalisé une campagne de simulations sur des configurations à haute énergie, jusqu'à présent peu explorées en littérature. Ces campagnes de calculs permettent en particulier d'explorer l'effet de la nature de la paroi, de l'angle d'impact ou de la pression ambiante sur le phénomène de *splash*. Ces calculs nécessitent des maillages pouvant dépasser le milliard de points et impliquent l'adaptation des pratiques de calcul décrites aussi dans ce travail, et appliquées lors de l'utilisation des supercalculateurs au niveau régional ou national.

Abstract

In-flight icing prevention is a major issue in the aeronautical world, since it's one of the major causes of accidents. When supercooled droplets impact the airfoil, icing accretion occurs and can dramatically deteriorate the aeronautical performances or obstruct sensors. In this context, a deep understanding of drop impact phenomenon is needed to answer the new regulations from certification agencies and at the same time to improve the efficiency of ice protection devices. Using a Direct Numerical Simulation (DNS) tool allows us to provide physical quantities hard to access by experimental means. However, high-velocity impacts demand the use of precise, conservative and stable numerical methods, as well as high computational resources. In this PhD, we make a contribution to the understanding of drop impact on different targets (dry wall or liquid film) with both low and high impact velocity. This work has been accomplished by developing and using the DNS code DYJEAT based on incompressible Navier-Stokes equations for two-phase flows. The use of both Level-Set and Volume-of-Fluid methods allows us to cope with this numerical challenge. First, spreading phenomenon is studied by implementing a law for capillary effects at the triple line. Then, the crown formation following the impact on a liquid film is analyzed. Specific methods for post-processing are developed to precisely characterize both geometrical crown topology and secondary droplets. From the analysis of high-velocity impacts recorded by ONERA lab, we devise and perform a series of simulations on configurations barely addressed by now in the literature. The influence of wettability, incidence angle and ambient pressure on splashing phenomenon are highlighted. This kind of simulation requires heavily refined mesh surpassing the billion mesh cells. In this high-performance context, calculation practices need to be reworked to efficiently perform simulation and post-processing on supercomputer at a regional or national level.

Remerciements

Une thèse, c'est une période de trois ans qui constitue une expérience professionnelle autant que personnelle. Aux cycles d'avancées et de blocages scientifiques se superposent les hauts et les bas de la vie. Cette section est donc pour moi l'occasion de jeter un oeil en arrière pour remercier certaines des personnes qui ont pu contribuer à ces moments du doctorat.

Avant tout, je tiens à remercier les six personnes de mon jury de thèse pour leur présence, leur lecture du manuscrit, leur attention et leurs nombreuses questions pendant la soutenance. Au delà de l'exercice lui-même, ce moment était important pour inscrire ces travaux dans le contexte scientifique lui-même et ont permis de dégager nombre de voies à suivre pour la poursuite. Merci donc à M.Josserand pour ses travaux et pour son soutien pendant la soutenance en tant que président du jury ; à M.Berlemont pour ses retours et sa tolérance malgré les quelques "essais stylistiques" auxquels j'ai pu me laisser aller ; à M.Le Touzé, pour son dynamisme bienveillant, ainsi que pour la richesse de son rapport ; à M.Vincent de m'avoir permis d'améliorer ce manuscrit par ses retours et de m'avoir permis d'accéder aux ressources du calcul national ; à M.Tanguy pour son soutien et le partage de son expérience lors de notre escapade à Venise ; à Mme.Weynans enfin pour sa lecture attentive du manuscrit, ses questions et son ouverture.

Merci à Z.Bouali et V.Robin de m'avoir chaleureusement accueilli à l'ENSMA et de m'avoir permis de terminer cette thèse dans la quasi-sérénité alors que rien ne les y obligeait.

Merci aux personnes de l'ONERA avec qui j'ai pu collaborer, souvent avec beaucoup de sympathie. Je pense particulièrement à l'équipe expérimentale : Pierre B., Virginel et Asma. Côté froid, merci à Pierre T. et à Philippe V. d'avoir dégagé quelques heures dans leurs agendas surchargés pour faire un retour sur notre travail ; merci à Emmanuel pour sa gentillesse. Merci à Corinne P. et à Valérie pour le travail accompli avec le sourire, sans qui le département ne tournerait pas. Merci à toutes celles et tous ceux de l'ONERA qui contribuent à instaurer une ambiance conviviale et qui gardent leur bienveillance dans des contextes où la mesquinerie peut être le choix facile pour nous tous. Merci enfin aux personnes qui ont spontanément émis, directement ou indirectement, des retours constructifs ou/et positifs sur notre travail. Il suffit parfois d'une phrase pour redonner un élan de motivation, et faire la différence dans les moments difficiles.

Vient le tour des encadrants, dont je ne soulignerai pas ici que la compétence technique. Jean-Luc, je sais que la longueur te "gonflera" (;P), mais je te remercie pour ta présence au quotidien et ton attention, même si tu te plais parfois à la cacher sous des airs rustres. Tu vérifieras bien pour moi que le Minotaure est toujours là ! Davide, ta proximité a été importante et m'a permis de te parler sans gêne quand c'était nécessaire, et de prendre du plaisir dans nos échanges le reste du temps (*It's hacking time!*). Ne laisse pas cette gentillesse qui te définit se faire noircir.

A l'ensemble des stagiaires, doctorants ou post-doctorants rencontrés à ou via l'ONERA (je ne fais pas la liste par peur d'un oubli), merci pour tous les moments du quotidien. Une pensée particulière à plusieurs d'entre eux avec qui j'ai partagé des moments privilégiés. A Jeanne : merci pour ton dynamisme, ta légèreté et pour la belle soirée Thanksgiving. A Emilie pour sa gentillesse et pour les électrodes sur la tête. A Pierre D. : merci Messire. A Anthony : merci pour toutes les histoires *what the fuck* que tu as partagées ! A Loïc l'astronome grivois : merci pour ta droiture, ta cuisine et la soirée astro'. A Baptiste le canari dessinateur : courage pour la fin, je songe à tout ce qu'on s'est dit en te remerciant pour les moments partagés. A Jeff, qui s'est perdu dans la montagne (*tout, tout y*

est passé) : merci pour l'apéro à l'eau, pour le passage au 13h, mais pas pour la Suze. A Matthias, ses chats et ses histoires : merci pour tous les fous rires, et longue vie aux pipistrelles. A Isabelle et ses cailloux, pour les longues discussions sur tous les sujets, tu m'as beaucoup apporté personnellement en diffusant autour de toi beaucoup de bienveillance - merci. A Charlotte : pour les sorties, les soirées balcons et pour ta gentillesse. A Vincent et son mass : *Prost!*

"Garder une vie" en dehors de la thèse permet de prendre du recul sur son travail et de tenter de l'aborder avec sérénité même dans les moments difficiles. Je veux donc remercier plusieurs personnes qui y ont contribué.

A mes élèves d'abord durant les quelques 130 heures de cours donnés, et tout particulièrement à mes quatre "poulains" : Lucie, Robin, Elise, Albane - merci pour votre investissement et votre enthousiasme. A Iovi avec qui j'ai pris plaisir à enseigner à l'Université, merci pour ton énergie débordante et pour les moments café le matin!

Aux belles rencontres musicales : à Corinne De P., à Stela, à Cécile, Marie-Pierre et toute la bande de l'orchestre de Musique & Ondes, et à mes nouveaux compères de l'Orchestre Universitaire de Poitiers pour ces beaux moments déjà vécus et à venir (*Toï toi* à nous!).

A tous les ami.e.s, les grands et les petits, rencontrés du collège à l'école, à la maison ou sur le net, certains résolument trop loin aujourd'hui.

A Thomas, pour celui que tu es depuis l'enfance et tous ces moments précieux vécus ensemble, jusqu'à ce magnifique voyage en Mongolie.

A Ophélie, une pensée tendre pour tous les souvenirs que l'on s'est offert, pour ton soutien et ton affection. Je n'oublierai rien de tout ça. Merci.

A ma famille enfin, toute la tribu : Louis, Marie-Claude, Nathalie, Bodo, Julien, Katy, Ewan, Nina, Théodore, Augustine, Gina & Léa. Merci pour tout.



*Hate is always foolish, love is always wise
Always try to be nice, but never fail to be kind*

Y'a plus qu'à.

Table des matières

Introduction générale	1
1 Risque SLD et mécanismes d'impact de gouttes : cadre de l'étude et état de l'art.	5
1.1 Les SLD : du risque majeur à l'objet d'étude	5
1.1.1 Contexte historique de l'étude des SLD	5
1.1.2 Principaux mécanismes de formation des SLD	6
1.1.3 Définition de la gamme SLD	7
1.1.4 Vers la physique de l'impact de goutte	12
1.2 Impact sur paroi sèche	13
1.2.1 Profils d'impacts	14
1.2.2 Premier contact : déformation de la goutte et emprisonnement de bulle(s) d'air.	15
1.2.3 Étalement de la goutte sur la paroi - dépôt et rebond.	16
1.2.4 <i>Splash!</i> - Mécanismes supposés et modèles	18
1.3 Impact sur film liquide	26
1.3.1 Paroi mouillée et topologies d'impact.	27
1.3.2 Formation de la couronne liquide.	28
1.3.3 Dynamique de la couronne liquide.	31
1.3.4 <i>Splash</i> sur film liquide.	33
1.3.5 Simulations d'impact sur film en conditions SLD.	35
1.4 Travaux déjà réalisés à l'ONERA sur l'impact de SLD	37
1.5 Bilan, discussion et objectifs de la thèse	39
1.5.1 Bilan de l'état de l'art	39
1.5.2 Objectifs de l'étude et stratégie retenue.	41
1.5.3 Quelques points non abordés...	42
2 DYJEAT : Code diphasique de résolution directe des équations de Navier-Stokes incompressibles	45
2.1 Préambule	45
2.2 Modèle physique	46
2.3 Méthode numérique pour la résolution	49
2.3.1 Maillage régulier et décentrement des variables.	49
2.3.2 Algorithme de projection dans la description monophasique	50
2.3.3 Conditions aux limites	54
2.3.4 Méthode de suivi d'interface couplée Level Set - Volume of Fluid.	57
2.3.5 Modification du solveur monophasique par la présence d'interface.	63
2.3.6 Intégration temporelle et résumé général de l'algorithme	70
2.4 Conclusion	72

3 Etude du comportement du code et développements numériques en préparation à la simulation d'impact.	73
3.1 Etude de la génération de courants parasites lors de la simulation 2D d'une goutte statique.	73
3.1.1 Moyens testés pour la réduction des courants parasites. . .	74
3.1.2 Identification de l'interpolation dans la méthode Ghost comme source prépondérante de courants parasites. . . .	75
3.2 Développements numériques dans le contexte du calcul haute performance.	79
3.2.1 Optimisation des performances par restriction du domaine d'application du suivi d'interface.	79
3.2.2 Etude de scalabilité sur un cas de transport de goutte. . .	80
3.2.3 Développement de méthodes de post-traitement pour l'extraction de données des simulations DNS de grande taille. . .	84
3.3 Bilan du chapitre	87
4 Etude d'impacts à faible vitesse sur des configurations de la littérature.	89
4.1 Etude d'un impact sans <i>splash</i> - prise en compte des effets capillaires en paroi.	90
4.1.1 Retour sur l'angle de contact.	90
4.1.2 Implémentation du modèle d'angle de contact	93
4.1.3 Étude détaillée d'un impact en régime de dépôt.	95
4.2 Etude d'un impact sur film avec <i>splash</i>	99
4.2.1 Présentation et pertinence du cas d'impact de Cossali et al. . .	99
4.2.2 Première validation des résultats numériques.	102
4.2.3 Caractérisation de la couronne et des structures secondaires. . .	103
4.3 Bilan du chapitre.	108
5 Impact de goutte en régime SLD : étude paramétrique pour la prédiction du <i>splash</i> et du taux de masse déposée en paroi	109
5.1 Approche expérimentale sur l'impact de goutte	109
5.1.1 Set-up expérimental	109
5.1.2 Traitement des acquisitions et dimensionnement des calculs	111
5.2 Etude par simulation numérique directe.	115
5.2.1 Ecart à l'expérience et influence de la nature de la cible sur la topologie obtenue.	115
5.2.2 Effet de la densité de l'air sur le <i>splash</i>	117
5.2.3 Influence de l'angle d'impact sur le <i>splash</i>	118
5.3 Bilan du chapitre.	120
Conclusion de l'étude, discussion et perspectives.	123
Bibliographie.	127
Annexe A - Article publié durant la thèse.	137

Introduction générale

Le givrage est aujourd'hui l'une des principales causes d'accidents lors du vol d'un aéronef. En effet, en 2008, la Direction Générale de l'Aviation Civile classe "l'incident lié au givrage ou aux procédures de dégivrages" comme le quatrième risque par ordre de priorité [1]. Entre 1989 et 2012, 43 accidents dans le monde sont causés, en partie au moins, par la présence de givre sur les ailes [2]. Le givre peut également s'accumuler sur les capteurs, qui peuvent alors livrer de mauvaises informations : en Juillet 2014, le vol AH5017 s'écrase dans le Nord du Mali ; les causes de l'accident qui entraîne la mort de 116 personnes impliquent l'obstruction d'un capteur de pression à l'avant de l'appareil par des cristaux de glace [3].

Face à ces constats, les normes évoluent pour prendre en compte les risques liés aux givrage. Depuis 2003, l'EASA (European Aviation Safety Agency) prévoit une certification pour le vol en conditions givrantes à travers l'annexe C de la norme CS-25 [4] applicable aux grands avions (masse supérieure à 5670kg au décollage hors transport régional). Cette norme requiert une bonne tenue de l'appareil en conditions givrantes par des dispositifs de protection adaptés (zone chauffée, protections mécaniques ...). Ces protections représentent un surplus de masse ou une dépense d'énergie que les constructeurs tentent d'optimiser. Pour cela, une compréhension fine des différents phénomènes impliqués représente un intérêt évident et permet d'envisager une amélioration des systèmes de dégivrages existants ou des innovations technologiques sur le sujet (nouveau traitement de paroi par exemple).

Parmi les conditions givrantes à risque, les SLD (Supercooled Large Droplet) font l'objet d'une nouvelle annexe à cette norme en 2015 (Appendice O). Ce sont des gouttes de diamètre supérieur à $50 \mu m$, en état surfondu, présentes dans certains nuages. Cet équilibre métastable est rompu lors de l'impact, pouvant conduire à l'accrétion de givre si celui-ci a lieu en dehors des zones protégées. Dans les zones protégées, l'impact de SLD représente également un risque : en effet, ces impacts à haute énergie peuvent conduire à l'émission de structures secondaires, susceptibles d'impacter de nouveau en aval. La masse liquide déposée sur la paroi peut également ruisseler jusqu'à des zones non protégées et se solidifier à cet endroit dans des formes de glace particulièrement dangereuses. L'étude du mécanisme d'impact se trouve donc au premier plan, tout comme la sensibilité de celui-ci à la variation des conditions de vol (vitesse, altitude, angle d'attaque par exemple).

Parallèlement à cela, l'étude du phénomène d'impact de goutte a connu une effervescence renouvelée depuis les années 2000. Jusqu'à cette date, il était très difficile pour les travaux académiques d'explorer les mécanismes rapides se produisant en début d'impact, du fait de la difficulté d'accès aux échelles de temps et de longueur concernées. En effet, les phénomènes mis en jeu peuvent se dérouler sur quelques micro-secondes et, nous le verrons, sur des distances caractéristiques micrométriques voire sub-micrométriques.

L'évolution des moyens techniques permet aujourd'hui d'explorer ces

phénomènes. D'une part, les caméras rapides atteignent désormais des fréquences qui peuvent dépasser le million d'images par seconde en conservant une résolution suffisante pour une visualisation lisible du phénomène. D'autre part, la puissance croissante des supercalculateurs permet d'aborder ce phénomène par la simulation numérique directe : les calculateurs, même au rang régional, proposent l'accès à plusieurs milliers de cœurs de calcul, sous réserve d'une programmation adaptée. Enfin, les progrès dans les méthodes numériques dotent les codes de calcul d'une meilleure robustesse, point hautement sensible dans la simulation diphasique à fort rapport de densité impliquant des vitesses importantes.

Pour autant, et malgré la progression fulgurante dans le domaine, la compréhension de certains phénomènes associés à l'impact reste à approfondir. Un point particulièrement complexe est la prédiction du *splash*, qui désigne l'éjection de liquide hors de la cible de l'impact. Des topologies très différentes peuvent apparaître, sous l'influence de paramètres physiques nombreux, si bien que les modèles prédictifs présents dans la littérature restent cantonnés à des domaines de validité restreints. De plus, la quasi-totalité des travaux académiques portant sur l'impact de goutte ont été réalisés sur des gouttes d'ordre millimétrique avec des vitesses de quelques mètres par seconde, si bien que la validité des résultats obtenus reste à démontrer dans le régime SLD.

L'ONERA, en tant qu'Établissement Public à caractère Industriel et Commercial (EPIC), se positionne à la frontière entre ces travaux académiques et les attentes opérationnelles des industriels. Son objectif sur cette thématique est donc autant une meilleure compréhension des mécanismes physiques de l'impact que la mise en place de modèles prédictifs, en particulier pour le dépôt de liquide sur la paroi dans le régime SLD. Pour cela, une série de projets autour du givrage a été lancé à l'ONERA, sous pilotage partagé avec des acteurs industriels, académiques et étatiques. Ces projets ont également impliqué des travaux théoriques et expérimentaux sur l'impact de SLD. Si l'approche expérimentale avait déjà pu permettre l'obtention de données pour alimenter les modèles, elle manquait de moyens d'accès aux grandeurs locales, et donc à la compréhension fine des mécanismes. La simulation numérique est donc apparue comme un choix complémentaire pertinent, encouragé par la présence d'une expertise au sein du laboratoire sur la simulation d'écoulements diphasiques complexes, tels que l'atomisation.

C'est dans ce cadre que se place cette thèse. Elle consiste à étudier les mécanismes d'impact de goutte à haute vitesse sur paroi sèche ou mouillée par simulation numérique directe 3D des équations de Navier-Stokes incompressibles, sans changement de phase, en utilisant et en développant le code de calcul existant DYJEAT.

Ce mémoire est organisé en 5 chapitres.

Dans le chapitre 1, nous caractériserons d'abord le régime des SLD pour mieux positionner le cadre de l'étude. Nous présenterons ensuite un état de l'art

général sur le phénomène d'impact de goutte, sur paroi sèche d'une part, et sur film liquide d'autre part. En particulier, une revue des mécanismes et paramètres physiques intervenant dans le déclenchement du *splashing* sera proposée. Enfin, les principaux résultats issus des recherches à l'ONERA ces dernières années seront exposés.

Dans le chapitre 2, le code DYJEAT existant en début de thèse sera présenté. Le modèle physique, les méthodes numériques et la discrétisation seront successivement explicités.

Le chapitre 3 est consacré aux études et aux développements centrés sur le code numérique. Nous nous intéressons d'abord à un cas de goutte statique en analysant finement le comportement du code de calcul. Le traitement des termes capillaires en particulier a fait l'objet d'une étude approfondie afin de réduire l'amplitude des courants parasites susceptibles de déplacer l'interface lors d'impacts à faible énergie. Par la suite, un travail est mené pour continuer à porter le code dans le cadre du Calcul Haute Performance en vue des simulations d'impacts à grande vitesse, nécessitant des maillages importants : pour cela, une réduction du temps de calcul est obtenue, notamment par l'introduction d'une méthode de bandes étroites. Une analyse de scalabilité approfondie est proposée sur la récente machine Jean-Zay de l'IDRIS. Le développement de méthodes adaptées pour le post-traitement de grands calculs fait enfin l'objet d'une section.

Dans le chapitre 4, nous simulerons des impacts à faible vitesse à partir de configurations de la littérature. Nous traitons tout d'abord un cas de dépôt dans lequel les effets de mouillabilité jouent un rôle important sur l'étalement. Après une brève présentation de la physique de la ligne triple, une méthode numérique permettant la prise en compte d'une loi d'angle de contact est choisie et implémentée. La validité de la méthode est jaugée sur un cas d'impact sur paroi sèche où les effets à la ligne triple ont une forte influence sur la dynamique d'étalement. Un impact sur film liquide est également proposé et permet d'illustrer la différence de topologie engendrée par la nature de la cible. Des configurations à plus forte énergie sont traitées et permettent d'étudier numériquement la formation de couronne. On s'intéressera particulièrement à l'influence des méthodes numériques et maillage pour la bonne prédiction du *splash*.

Le chapitre 5 traite enfin des impacts dans le régime SLD. L'analyse des expériences menées à l'ONERA permettra d'abord de définir une configuration type pour le calcul. Sur ce cas, on s'intéressera à la formation du *splash* et de la couronne qui exhibe une topologie différente que celle obtenue dans l'expérience. L'outil numérique sera utilisé pour explorer les différentes hypothèses prises pour la définition de la configuration et on montrera l'impact de certaines grandeurs physiques, telles que la densité de l'air ou la nature de la paroi. On portera une attention particulière aux premiers instants de l'impact en caractérisant la lamelle liquide éjectée et les structures secondaires.

1 Risque SLD et mécanismes d'impact de gouttes : cadre de l'étude et état de l'art.

Contenu du chapitre

1.1 Les SLD : du risque majeur à l'objet d'étude . . .	5
1.1.1 Contexte historique de l'étude des SLD	5
1.1.2 Principaux mécanismes de formation des SLD	6
1.1.3 Définition de la gamme SLD	7
1.1.4 Vers la physique de l'impact de goutte	12
1.2 Impact sur paroi sèche	13
1.2.1 Profils d'impacts	14
1.2.2 Premier contact : déformation de la goutte et emprisonnement de bulle(s) d'air.	15
1.2.3 Étalement de la goutte sur la paroi - dépôt et rebond.	16
1.2.4 <i>Splash!</i> - Mécanismes supposés et modèles	18
1.3 Impact sur film liquide	26
1.3.1 Paroi mouillée et topologies d'impact.	27
1.3.2 Formation de la couronne liquide.	28
1.3.3 Dynamique de la couronne liquide.	31
1.3.4 <i>Splash</i> sur film liquide.	33
1.3.5 Simulations d'impact sur film en conditions SLD.	35
1.4 Travaux déjà réalisés à l'ONERA sur l'impact de SLD	37
1.5 Bilan, discussion et objectifs de la thèse	39
1.5.1 Bilan de l'état de l'art	39
1.5.2 Objectifs de l'étude et stratégie retenue.	41
1.5.3 Quelques points non abordés...	42

1.1 Les SLD : du risque majeur à l'objet d'étude

Dans cette partie, on dressera un bref historique de l'étude des SLD ainsi que des environnements météorologiques favorables à leur formation, en s'appuyant sur les travaux de McDonough publiés en 2015 [5]. On proposera ensuite des plages de valeurs pour les différents paramètres caractérisant le problème d'impact dans le contexte aéronautique.

1.1.1 Contexte historique de l'étude des SLD

Dans les années 1930, le givrage a été reconnu comme risque en vol ; dans la décennie qui a suivi, une série de vols instrumentés ont pu alimenter les recherches en données et conduire à la définition de certifications pour les appareils souhaitant naviguer en conditions givrantes (Appendice C du FAR25 pour les gros transporteurs). Néanmoins, l'enveloppe définissant ces conditions ne

considérerait alors que la présence de petites gouttes ($D < 50 \mu m$), la présence notable de gouttes de diamètre supérieur (Supercooled Large Droplet - SLD) étant alors considérée comme rare. La conception des systèmes anti-givre (systèmes pneumatiques notamment) a ainsi été basée sur cette norme qui sous-estimait le risque lié aux SLD.

Les années 1990 ont vu plusieurs accidents se produire impliquant des conditions météorologiques favorables au développement de ce risque. En 1994, le crash d'un ATR-72 sous conditions SLD provoque la mort de 68 personnes près de Chicago. En 1997, 29 personnes perdent la vie sur la phase de descente d'un EMB-120 vers l'aéroport de Détroit, à proximité d'une zone de bruine givrante. Ces événements ont stimulé l'émergence de nouvelles campagnes de mesures et de programmes de recherche pour mieux comprendre les mécanismes de formation des SLD et ainsi mieux prédire et localiser leur présence. Ces programmes de recherche, toujours en cours, ont conduit à une redéfinition de l'enveloppe du risque givre à travers de nouvelles certifications (appendice O aux règles de certification FAR25 et CS25).

Les modèles météorologiques actuels donnent une estimation de ce risque et permettent aux pilotes d'éviter certaines zones à risque. Néanmoins, les modèles employés dans les prévisions météorologiques restent à améliorer sur les mécanismes de formation : les inhomogénéités au sein d'un même nuage ou la disparité de concentration des sites de nucléations sont par exemple des points durs de ces modèles. La validité des modèles est testée à partir des rapports des pilotes ou d'instruments en vol. Ainsi, le modèle *Rapid Update Cycle* [6], utilisé comme outil de prévision, a montré sur l'hiver 2005 une forte sous-estimation du risque SLD, les zones à risques prédites ne couvrant que 30% des zones à risques réelles. On comprend donc l'activité forte des recherches sur ces sujets, et la parution récente de nouveaux modèles [5]. Aujourd'hui encore, la réalisation de vols d'essais et les rapports de pilotes associés aux données satellites d'une part, et les expériences en soufflerie d'autre part, restent les sources principales de données pour alimenter les modèles.

1.1.2 Principaux mécanismes de formation des SLD

Deux mécanismes conduisent à la formation de SLD. La nature n'étant jamais simple, ces mécanismes ne sont pas les seuls susceptibles de se produire, mais sont retenus comme majoritaires.

Le premier est le mécanisme dit de « pluie chaude » (*warm rain*) [7]. Ce mécanisme est majoritairement associé à une température en sommet de nuage chaude, qui empêche la formation de cristaux de glace au profit d'une croissance des gouttes par coalescence. Geresdi et al. [8] illustrent ainsi que 90 % des bruines verglaçantes (*freezing drizzle* - SLD de diamètre supérieur à $100 \mu m$) recensées dans leur étude se sont formées par ce mécanisme avec des températures en sommet de nuage supérieures à $-12^\circ C$. Les gouttes restent donc à l'état surfondues pendant toute leur croissance jusqu'à leur chute. La stratification du nuage (zones sèches, zones pauvres en petites gouttes, températures variables) influence la vie de la goutte pendant sa chute mais doit être mieux comprise et est

peu prise en compte dans la modélisation. De plus, la convection atmosphérique peut générer des zones d’hypersaturation forte favorisant fortement la croissance de SLD.

Le second mécanisme est celui de la "pluie givrante" (*freezing rain*) qui exige une structure verticale en trois couches : au cours de ce phénomène, des cristaux de glace se formant en altitude dans des nuages denses chutent à travers une zone plus chaude du nuage (> 0 °C) et fondent. Les grosses gouttes résultantes traversent enfin une zone froide de basse altitude les amenant à l’état surfondu. Ce processus engendre un risque de pluie givrante, avec des exemples spectaculaires référencés sous les 3000 pieds [9].

1.1.3 Définition de la gamme SLD

Entre les années 1995 et 2000, une série de projets réalisés par la NASA (National Aeronautics and Space Administration) et l’EC (Environment Canada) ont permis la collecte de données en conditions givrantes par des campagnes de vol. Pour l’anecdote, cette collecte ne s’est pas faite sans risque car plusieurs vols d’essai ont dû modifier leur plan de route en cours d’essai : [10] rapporte par exemple la décision du pilote de sortir d’une zone de bruine givrante après deux minutes d’exposition, à cause d’une accréation de givre très rapide observée sur les vitres du cockpit, témoignage appuyant de nouveau la dangerosité du phénomène. Ces données ont été compilées [11] pour dessiner des enveloppes et profils type définissant les conditions givrantes dans l’annexe O des normes CS-25 dédiées aux SLD [4].

L’ensemble des points de données obtenus ont été classés en quatre environnements caractéristiques de conditions givrantes, en se basant sur le diamètre maximum des gouttes D_{max} et sur le diamètre médian en volume (MVD). Sont différenciées tout d’abord les conditions de bruine givrante ($D_{max} \leq 500 \mu m$), et de pluie givrante ($D_{max} > 500 \mu m$). Chacune de ces catégories est ensuite séparée selon le diamètre moyen des gouttes de la série, avec un seuil à $40 \mu m$. Ces environnements sont représentés sur la Table 1. La fraction en masse cumulée pour chacun de ces environnements est représentée sur la Figure 1.

TABLE 1 – Tableau classant les observations SLD en vol de [11] dans quatre catégories. Chaque observation correspond à une acquisition sur une plage de temps de $\Delta t = 30s$.

Définition	Gamme de de MVD (μm)	Gamme D_{max} (μm)	Nombre de points de collecte ($\Delta t = 30s$)	MVD (μm)	D_{max} (μm)
Bruine givrante	≤ 40	100-500	1469	20	389
Bruine givrante	> 40	100-500	335	110	474
Pluie givrante	≤ 40	> 500	193	19	1553
Pluie givrante	> 40	> 500	447	526	2229

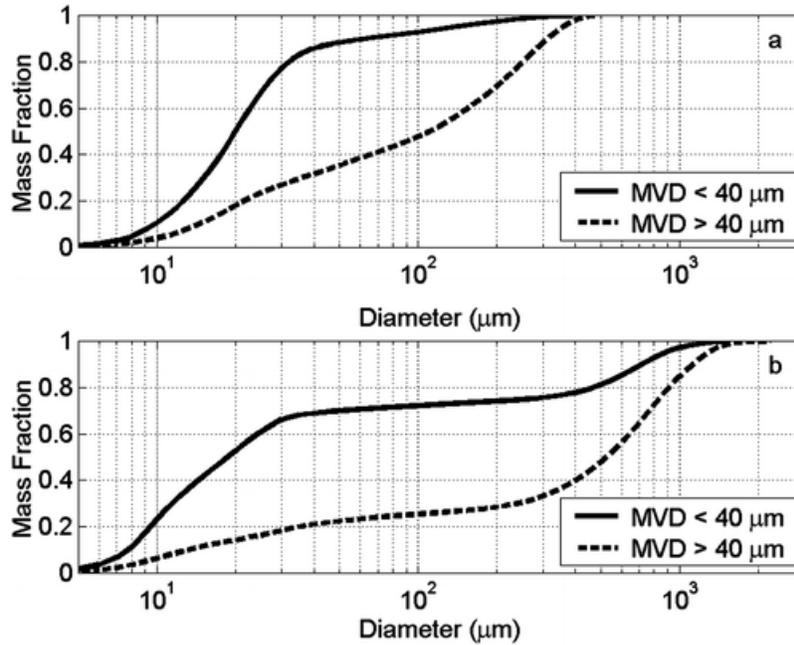


FIGURE 1 – Fraction en masse cumulée des SLD pour les cas de bruine givrante (a) et de pluie givrante (b).

La majorité des données collectées se rapporte à la catégorie de bruine givrante de faible MVD, dans laquelle 90% de la masse est portée par des gouttes non-SLD ($D < 50 \mu m$). Cependant, pour le reste des conditions (représentant 40% des observations rapportées dans la Table 1), une part importante de la masse est portée par des gouttes de plusieurs centaines de microns, avec pour le cas de pluie givrante une présence notable de gouttes millimétriques.

Les instrumentations à bord ont également pu permettre la mesure des contenus en eau liquide (LWC) et de la température pour chaque point de mesure. A partir de ces données, une enveloppe caractérisant les conditions SLD a été définie, englobant les conditions extrêmes rencontrées. Ces enveloppes, issues de l'appendice O de la norme CS-25, sont reprises dans les Figure 2 et 3. Le contenu en eau liquide en conditions SLD est généralement sous les $0.3g.m^{-3}$ ce qui correspond à des distances entre les gouttes de mille fois leur diamètre (en ordre de grandeur).

Les altitudes à risque se situent sous les 20.000 pieds (environ 6 km), avec des températures entre $-25^{\circ}C$ et $0^{\circ}C$. Les conditions de pluie givrante sont plus restreintes (12.000 pieds, $-13^{\circ}C$). A ces altitudes, la pression ambiante est abaissée par rapport au niveau de la mer : en ordre de grandeur -15% à 5.000 pieds, -30% à 10.000 pieds, -50% à 20.000 pieds. En situation de vol, une part importante des impacts ont lieu proche du point d'arrêt où la dépression due à l'altitude est partiellement contrebalancée. Par exemple, à 20.000 pieds et

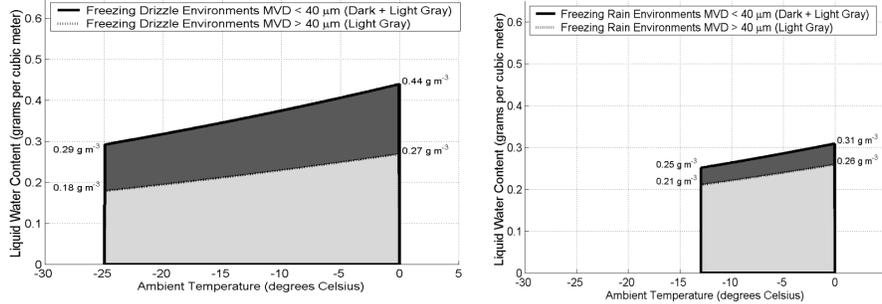


FIGURE 2 – Enveloppe LWC/température caractérisant le régime SLD pour des cas de bruine givrante (à gauche) et de pluie givrante (à droite).

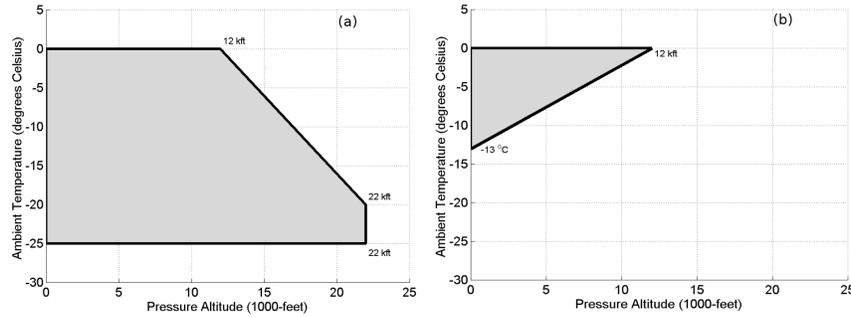


FIGURE 3 – Enveloppe Température/Altitude pour les cas de bruine givrante (a) et de pluie givrante (b)

180m/s, la pression totale est proche de 580hPa quand la pression à l'infini est à 460hPa.

Sur ces plages de température et de pression, les propriétés de l'air sont bien connues et disponibles dans les tables. Les propriétés de l'eau surfondue sont plus difficiles à déterminer.

La masse volumique de l'eau varie peu avec le couple (T,P) dans cette gamme de température et pression [12].

La viscosité dynamique de l'eau surfondue varie peu en fonction de la pression, mais fortement avec la température. En effet, [13] a réalisé en 2015 une série de mesure de viscosité dynamique μ_ℓ de l'eau surfondue, jusqu'à une température de -34°C , et a observé une forte variation en surfusion. Le fit de ses données proposé est $\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_s} - 1 \right)^{-\gamma}$ avec $T_s = 224.80\text{K}$, $\gamma = 1.7044$ et $\mu_0 = 1.36096 \times 10^{-4} \text{Pa.s}$. Son tracé est proposé en Figure 4. A -5°C , la viscosité est deux fois supérieure à sa valeur à 20°C ; à -12°C , trois fois; à -24°C , six fois.

La tension de surface eau/air ne varie que de quelques % sur cette gamme

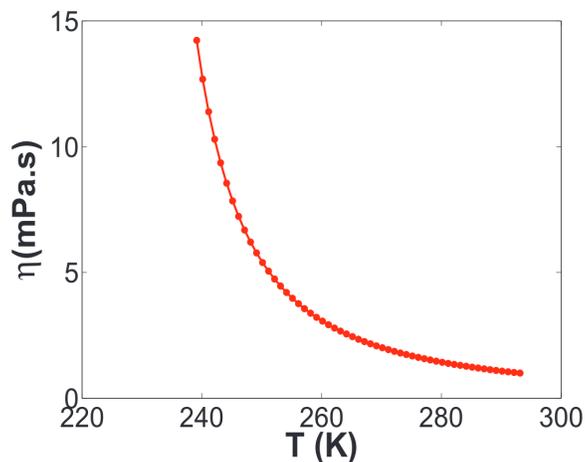


FIGURE 4 – Loi en puissance approximant les mesures de viscosité dynamique dans [13] sur une plage de température de -34°C à 20°C

de température, Hruby et al. ayant montré en 2014 que le point d’inflexion de la courbe $\sigma = f(T)$ ne se produit que vers -25°C [14]. Si la dépendance de la tension de surface à l’humidité relative n’est pas négligeable [15], la plupart des valeurs disponibles dans la littérature sont obtenues avec un air saturé proche de l’interface, rendant les mesures appropriées pour les conditions SLD (air saturé ou sur-saturé). La dépendance de σ à la pression est également négligeable sur cette gamme.

La traversée des zones à risque SLD s’effectue essentiellement dans les phases de montée et de descente des avions. La vitesse V est donc réduite par rapport à la vitesse de croisière (qui est de l’ordre de 250 m/s). On peut donc estimer la plage de la vitesse d’impact des gouttes de 70 m/s (ordre de grandeur de vitesse à l’atterrissage) jusqu’à 200 m/s (ordre de grandeur à 20.000 pieds en considérant une accélération constante pendant la montée vers une altitude de croisière à 30.000 pieds).

A partir des éléments précédents, on propose dans la Table 2 une plage de paramètres pertinents pour l’étude des SLD.

Il est intéressant de raisonner en nombres adimensionnels, notamment pour la comparaison aux études de la bibliographie. On introduit donc les nombres de Reynolds et de Weber liquide basés sur le diamètre de la goutte, comparant respectivement les effets inertiels aux effets visqueux d’une part, et les effets inertiels aux effets capillaires d’autre part :

$$Re_{\ell} = \frac{\rho_{\ell} V D_{SLD}}{\mu_{\ell}} \quad We_{\ell} = \frac{\rho_{\ell} V^2 D_{SLD}}{\sigma} \quad (1)$$

TABLE 2 – Plage de paramètres retenus pour la caractérisation du domaine SLD, en complément aux figures 1, 2, 3, 4.

Conditions Aérodynamiques	T	-25 - 0	($^{\circ}C$)
	P	500 - 1000	(hPa)
	V	70 - 250	($m.s^{-1}$)
	D_{SLD}	50 - 2000	(μm)
Propriétés des fluides	ρ_{ℓ}	1.0×10^3	($kg.m^{-3}$)
	μ_{ℓ}	1.87×10^{-3} - 6.5×10^{-3}	($Pa.s$)
	ρ_g	0.7 - 1.4	($kg.m^{-3}$)
	μ_g	1.6×10^{-5} - 1.7×10^{-5}	($Pa.s$)
	σ	75.5×10^{-3} - 79.0×10^{-3}	($N.m^{-1}$)

En faisant varier les paramètres (T, P, V, D_{SLD}), et en déduisant les propriétés des fluides à partir des lois énoncées précédemment, on peut construire une enveloppe délimitant les gammes de Re_{ℓ} et de We_{ℓ} caractérisant le domaine SLD : cette enveloppe est proposée en Figure 5. Pour la construction de cette enveloppe, on a utilisé un script qui a exploré ces paramètres avec les limites proposées dans la Table 2. Aucune dépendance entre ces conditions n’a été prise en compte, l’enveloppe est donc légèrement surdimensionnée. Il apparaît en effet comme peu probable qu’un avion vole à $70 m.s^{-1}$ à 20.000 pieds (et inversement, une vitesse de $250 m.s^{-1}$ à l’atterrissage est peu souhaitable...). Affiner l’enveloppe reviendrait à expliciter des lois de dépendance entre ces paramètres, et impliquerait de prendre en compte la variabilité des conditions météorologiques et un profil de vol plus détaillé. On se contentera donc de cette analyse pour cette enveloppe, qui à la connaissance de l’auteur n’a jamais été formulée dans la littérature. Elle fournit un point de repère intéressant dans l’espace des nombres adimensionnels pour caractériser ce régime, bien qu’elle soit loin d’être suffisante, nous le verrons, pour caractériser pleinement l’impact.

Il reste à évoquer la nature de la cible de l’impact. Dans le cas du régime SLD, la paroi peut être sèche (aile sèche, ou impact sur givre), ou bien mouillée par un film liquide issu des impacts précédents (en zone chauffée en particulier), ce film pouvant transitionner vers des ruisselets.

Dans le cas d’une paroi sèche, la rugosité peut provenir de l’état de surface du matériau (usure de l’aile, motifs rainurés [16][17]) avec des rugosités de l’ordre de quelques dizaines de microns ou moins, ou bien de la présence de givre qui offre elle une large gamme de taille de rugosités. L’établissement de profils de rugosité type en situation d’accrétion a fait l’objet de travaux récents mettant en œuvre des méthodes optiques (analyse d’image, scan laser 3D). La Figure 6 tirée des travaux de McClain et al. en 2017 [18] montre un profil type de givre en condition *glaze*. On note que, selon la position sur la corde, des rugosités de quelques centaines de microns à des rugosités millimétriques peuvent exister. La zone proche du bord d’attaque montre une épaisseur plus forte de givre avec des rugosités de l’ordre de $500 \mu m$. Dans cette zone, des travaux de 2019 [19] montrent que les structures de quelques centaines de microns sont majoritaires

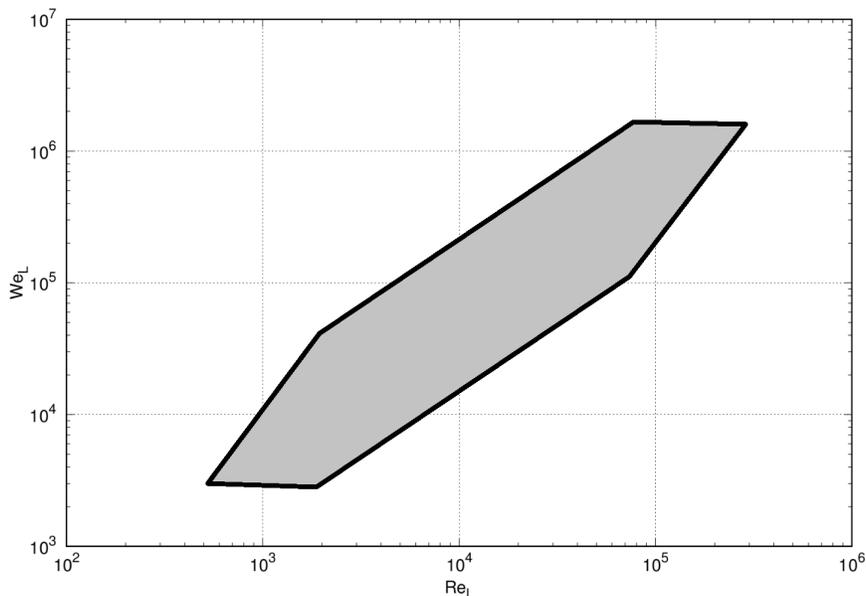


FIGURE 5 – Enveloppe Re_ℓ / We_ℓ proposée pour caractériser le régime d’impact SLD.

mais peuvent coexister avec des structures millimétriques. Dans ce cas, une caractérisation de la rugosité par une grandeur moyenne (R_a par exemple) peut se révéler insuffisante pour conclure sur le caractère lisse de la paroi.

Dans les zones chauffées, les impacts de gouttes successifs peuvent conduire à la formation d’un film liquide. En 2015, Zhang et al. [20] mesurent les caractéristiques géométriques du film et des ruisselets qui se créent à la suite de l’impact d’un spray sur un profil d’aile NACA0012, sous écoulement d’air de 10 à 25 $m.s^{-1}$. L’épaisseur du film est de l’ordre du diamètre des gouttes impactantes (10 à 50 μm dans [20]) tandis que l’épaisseur des ruisselets se trouve un ordre de grandeur au dessus. Bien que les vitesses et diamètres soient faibles par rapport au contexte SLD, ces travaux nous proposent une première description de la cible d’impact en zone chauffée.

1.1.4 Vers la physique de l’impact de goutte

On a défini le contexte qui a motivé la recherche des SLD et délimité le domaine d’étude. Pour une lutte efficace contre le givrage en vol, la compréhension fine du mécanisme d’impact de SLD apparaît comme de premier intérêt.

L’étude approfondie du phénomène d’impact de gouttes a débuté avec les travaux de Worthington à la fin du XIX^{eme} siècle, à partir de photographies et de dessins d’impacts sur films liquides [21][22]. Depuis, la majorité des travaux réalisés se sont portés sur des gouttes d’ordre millimétrique et des vitesses de

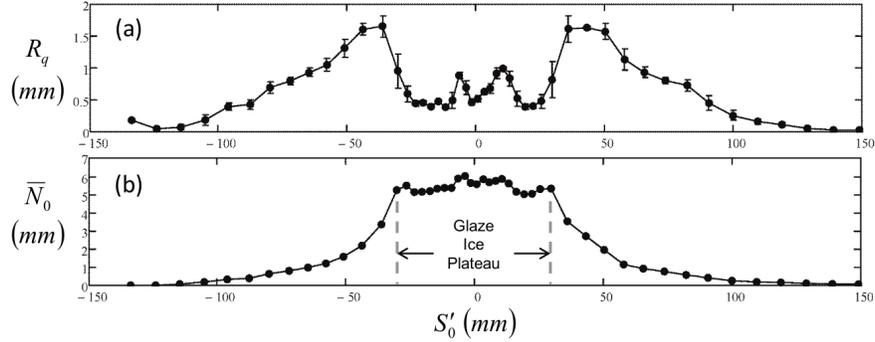


FIGURE 6 – Profil du givre déposé en fonction de la position sur le profil d’aile S'_0 . En haut : hauteur moyenne quadratique des rugosités R_q . En bas, épaisseur moyenne locale du givre \overline{N}_0 . Figure tirée de [18].

quelques mètres par seconde, et en conditions ambiantes (sans changement de phase). Bien que ces travaux se trouvent en dehors du domaine SLD, il est intéressant d’en comprendre la physique, afin de pouvoir étendre ou infirmer les conclusions dans le contexte aéronautique. C’est l’objet des deux sections suivantes.

Les études ont notamment pu montrer que la nature de la cible est de première importance dans la topologie de l’impact obtenue. La présence ou non d’un film liquide sur la paroi modifie les mécanismes physiques impliqués dans l’impact : à titre d’exemple, il sera beaucoup plus aisé d’obtenir une forme de couronne (nous l’illustrerons plus loin) lors de l’impact sur une épaisseur liquide que sur le cas d’une paroi sèche. De ce fait, les travaux sont séparés entre impacts sur paroi sèche et impacts sur films liquides, sans considérer de changement de phase. Au cours de ces revues, on gardera à l’esprit le contexte SLD, et on tentera de le mettre en regard avec les résultats de la littérature.

1.2 Impact sur paroi sèche

Dans cette partie, on proposera un bref état de l’art de l’impact sur paroi sèche, en se basant sur notamment sur la revue de Josserand & Thoroddsen de 2016 [23], et en mettant en avant quelques travaux parus depuis sur ce sujet. Les différentes topologies d’impact seront d’abord brièvement décrites. Les instants entourant le premier contact entre la goutte et la paroi font ensuite l’objet d’une attention particulière. Puis, on distinguera les cas d’étalement et de *splashing*, en prenant soin de préciser l’état de connaissance en terme de modélisation et de compréhension des mécanismes sous-jacents.

1.2.1 Profils d'impacts

L'impact d'une goutte sur une paroi sèche peut donner lieu à plusieurs topologies type d'impact. Rioboo et al. [24] distinguent six régimes, illustrés sur la Figure 7.

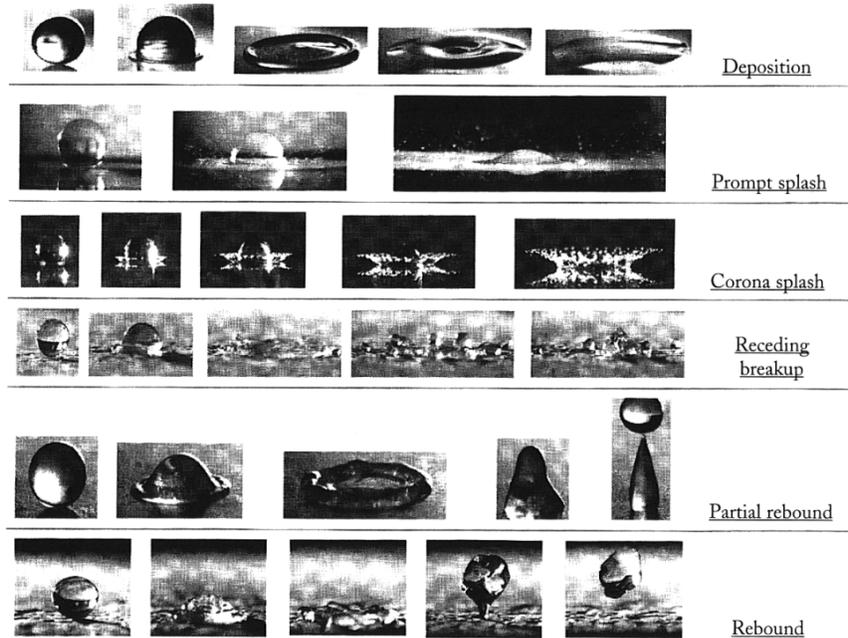


Fig. 3 Examples of the six kinds of outcomes (liquid, surface, velocity, advancing/receding contact angle, from top to bottom): water, S1, 1.16 m/s; 10°/6°; water, S3, 4.1 m/s, 0°/0°; ethanol, S1, 2.4 m/s, 0°/0°; water, S11, 1.16 m/s, 160°/130°; water, S9, 1.18 m/s, 105°/85°; water, S11, 0.9 m/s, 160°/130°.

FIGURE 7 – Six différents profils d'impact illustrés par Rioboo et al. [24]

- Le régime de **dépôt** : la goutte se déforme en restant attachée à la paroi, sans émission de goutte secondaire.
- L'impact avec émission rapide (*prompt splash*) : aux premiers instants de l'impact, des gouttes secondaires se détachent de la ligne de contact et sont émises avec une forte vitesse radiale.
- L'impact avec couronne (*corona splash*) : lors de l'impact, la lamelle liquide issue de la goutte décolle et prend une forme de couronne; des gouttes secondaires peuvent se former en extrémité de couronne.
- La rupture lors du retrait (*receding breakup*) : lors de la phase de retrait, l'épaisseur de liquide peut devenir suffisamment fine en amont du bourrelet pour qu'une partie du liquide se détache, créant des gouttes secondaires en paroi.
- **Rebond partiel** ou **rebond** : lorsque la goutte s'étale au-delà de son

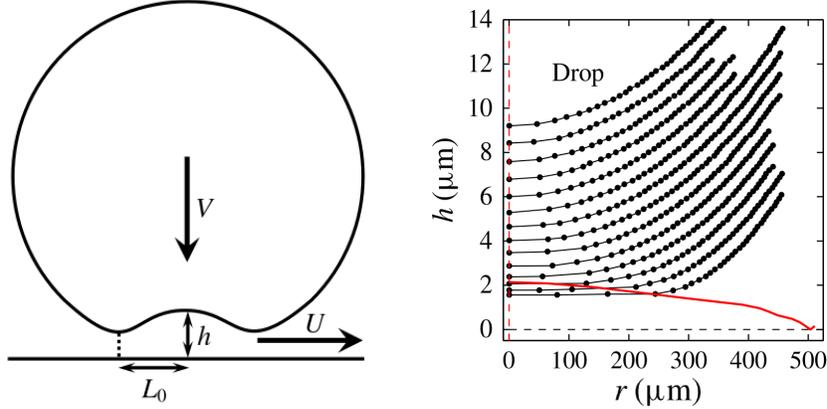


FIGURE 8 – (à gauche) Schématisation de la déformation de la goutte à l’approche de la paroi - (à droite) Visualisation de la déformation d’une goutte ($R_{curv} = 8.2 \text{ mm}$, $V = 2.43 \text{ m/s}$) - hauteur air en fonction du rayon au centre . Courbes en noir : profils successifs de la goutte avant impact ($\Delta t = 400 \text{ ns}$), jusqu’à : $2.2 \mu\text{s}$ avant l’impact ; courbe en rouge : contact. Reproduit de [25]

diamètre d’équilibre, la force de rappel (tension de surface) peut parfois être suffisante pour éjecter, lors de la rétractation, tout ou une partie de la goutte. Ce cas est favorisé par les surfaces très hydrophobes.

1.2.2 Premier contact : déformation de la goutte et emprisonnement de bulle(s) d’air.

Lorsqu’une goutte approche de la surface solide, elle comprime la couche d’air qui les sépare, qui tend à s’échapper à forte vitesse. Cette augmentation de la pression dans la couche d’air peut devenir suffisamment forte pour déformer le bas de la goutte : l’unique point de contact laisse alors place à un cercle et une bulle d’air se trouve emprisonnée.

La compréhension de ce phénomène a longtemps été freinée par les difficultés d’accès expérimentaux. En 2015, Li et Thoroddsen [25] mettent en œuvre des techniques d’interférométrie avec des pulsation laser de 50 ns, permettant une acquisition à 5 millions d’images par seconde. Ce montage expérimental a permis de capturer la dynamique de rétractation de bulles d’air sur des cas d’impacts de goutte millimétriques à quelques m.s^{-1} (Figure 8).

Lorsque la vitesse d’impact est importante, les effets compressibles ne sont pas négligeables dans la couche de gaz, retardant la déformation de la goutte, et réduisant ainsi le volume de gaz emprisonné. Pour quantifier cet effet, Mandre et al. [26] introduisent à partir d’études 2D le facteur de compressibilité ϵ (Eq. 2) : si $\epsilon^{-1} \gg 5$, les effets de compression ne sont *a priori* pas négligeables.

$$\epsilon = \frac{P_{atm}}{(RV^7 \rho_\ell^4 / \mu_g)^{1/3}} \quad (2)$$

Sur un cas SLD, en prenant $V \sim 100 \text{ m.s}^{-1}$, $D \sim 500 \text{ }\mu\text{m}$, on obtient un facteur $\epsilon^{-1} \sim 10^5$, ce qui nous place de loin dans ce régime de compressibilité. Mandre et al. construisent également, sur l'hypothèse de gaz isotherme, un modèle permettant de prédire le volume de gaz enfermé lors de l'impact : ce modèle prévoit que lorsque ϵ^{-1} augmente, le volume de gaz diminue. A de hautes vitesses, la hauteur du volume d'air enfermé dans les premiers instants de l'impact peut atteindre quelques dizaines de nm . A ces échelles des effets moléculaires interviennent. Les mêmes auteurs ont d'ailleurs limité leurs conclusions dans [27] en précisant qu'à de fortes vitesses, l'air était compressé trop rapidement et n'avait pas le temps d'être drainé en dehors de la zone d'impact, conduisant de nouveau à la capture de bulles. De récentes observations expérimentales menées par Burzynski et al. [28] ont appuyé cette remarque, en montrant une augmentation du volume enfermé avec ϵ^{-1} .

Aux échelles micrométriques, le rôle de la rugosité est rarement négligeable et encourage la formation de micro-bulles autour de la bulle centrale [29], complexifiant à nouveau le phénomène.

Si les modèles permettent de prédire correctement la hauteur et le rayon du disque d'air, ainsi que sa dynamique, sur des cas d'impacts à faible vitesse, ils restent à ajuster sur des cas à plus haute vitesse pour lesquels une physique plus complexe intervient. Décrire avec précision l'emprisonnement d'air dans le contexte SLD peut être intéressant pour une meilleure prédiction du changement de phase lors de l'impact ; le volume d'air emprisonné sur un impact de goutte pourrait également être révélateur, lors du givrage, du type de givre formé (givre blanc ou transparent). Néanmoins, les observations expérimentales tendent à montrer que l'interaction entre le bas de la goutte et cette couche de gaz n'influe pas sur la suite de l'impact pour l'obtention d'un éventuel *splashing* [30][28]. On n'approfondira donc pas ici cette étude et on poursuit la chronologie de l'impact en s'intéressant à l'étalement de la goutte sur la paroi

1.2.3 Étalement de la goutte sur la paroi - dépôt et rebond.

Le dépôt d'une goutte se caractérise par un liquide qui reste accroché à la paroi. Cette topologie d'impact est principalement rencontrée sur des cas d'impacts à faible énergie. Prédire la dynamique d'étalement (vitesse d'étalement, diamètre maximum atteint) possède des intérêts cruciaux dans de nombreux domaines industriels (techniques d'impression, dépôt de produit sur les cultures, ...). D'autres applications sont plus surprenantes : en 2014, Laan et al. [31] mènent une étude visant notamment à déterminer le diamètre maximum obtenu lors de l'impact de gouttes de sang en fonction des paramètres de l'impact, ceci dans le but d'améliorer la précision des outils de la police scientifique pour la reconstitution de scènes de crime. La Figure 9, tirée de cette étude, illustre un exemple d'une dynamique d'étalement possible. Dans ce cas, la goutte reste

immobile une fois son diamètre maximum atteint, ce qui n'est pas toujours le cas.

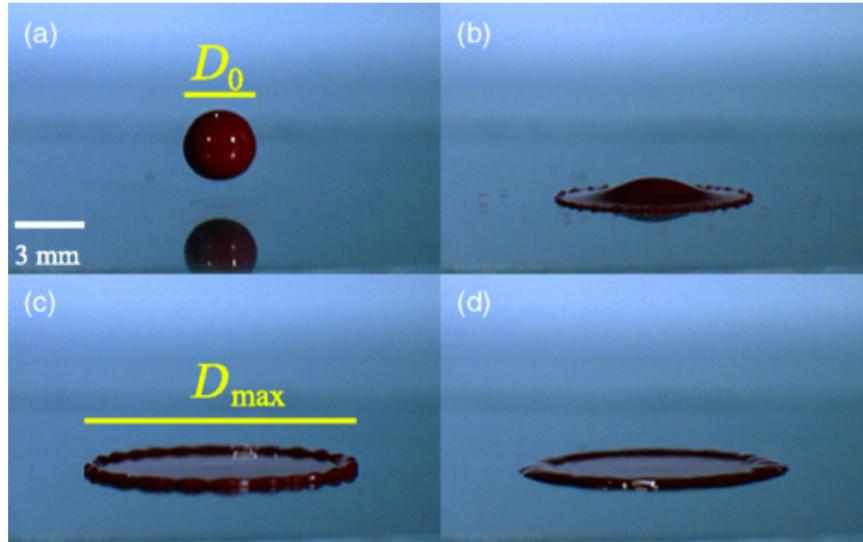


FIGURE 9 – Figure tirée de [31] illustrant un cas d'étalement. Impact d'une goutte de sang millimétrique à 2 m.s^{-1} Instants successifs : 0.2 ms avant impact (a), puis 0.6 ms (b), 2.4 ms (c) et 4 ms (d) après l'impact. Le sang exhibe un comportement d'étalement similaire à celui d'un fluide Newtonien.

En effet, la dynamique d'étalement est pilotée par une compétition entre les forces inertielles, capillaires et visqueuses. L'inertie promeut l'étalement suite à la redirection de la vitesse verticale initiale au contact de la paroi, tandis que la viscosité tend à dissiper cette énergie. Qu'une goutte se rétracte ou reste attachée à la surface lorsque le diamètre d'étalement maximum est atteint dépend des phénomènes physiques à la ligne triple.

Pour l'introduire brièvement, la ligne triple est formée de l'ensemble des points à la frontière entre la phase liquide, gazeuse et la paroi solide. Des interactions moléculaires résulte une force qui tend à étaler le liquide sur la paroi (fluide mouillant, surface dite hydrophile dans le cas de l'eau) ou à encourager sa rétractation (fluide non mouillant, surface dite hydrophobe dans le cas de l'eau). La modélisation de cette physique passe souvent par la notion d'angle de contact, défini comme l'angle mesuré entre la paroi et l'interface liquide/gaz (côté liquide). Nous approfondirons la description de la physique de la ligne triple plus loin dans la thèse.

Sur des cas de parois hydrophobes, la goutte se rétracte après avoir atteint son diamètre maximum. Sur des cas très hydrophobes, cette rétractation peut être suffisamment rapide pour éjecter tout ou une partie du volume liquide de la paroi (rebond partiel ou total). Si la goutte (ou un fragment) reste en paroi, son diamètre oscille autour de son diamètre d'équilibre (comportement type

masse-ressort amorti).

De nombreux modèles sont disponibles dans la littérature, basés sur des analyses théoriques ou des études expérimentales et aucun modèle ne semble émerger comme étant unificateur ou de précision supérieure à ses congénères sur une large plage de validité. Comme souligné par Josserand et Thoroddsen, ces proximités de résultats pour des modèles différents s'expliquent sans doute par le fait que la variation des paramètres physiques (dans la gamme d'étude usuelle) ne conduit pas à des variations très importantes du diamètre d'étalement. Nous reprenons à cette occasion dans la Table 3 différents modèles extraits de la littérature par [23], qui expriment le paramètre d'étalement $\beta = R_{max}/R_0$ en fonction de différents nombres sans dimension.

Modèle	Expression & Commentaire
Scheller et Bousfield [32]	Loi empirique basée sur des résultats expérimentaux $\beta \sim 0.61 (Re^2 Oh)^{\frac{1}{6}}$
Pasandideh-Fard et al. [33]	Bilan d'énergie, incluant l'angle de contact (θ_a) et conditions initiales. $\beta = \sqrt{\frac{We+12}{3(1-\cos(\theta_a))+4(We/\sqrt{Re})}}$
Ukiwe et Kwok[34]	Extension du modèle ci-dessus, θ_d étant l'angle de contact dynamique pendant l'étalement. $(We + 12)\beta = 8 + \beta^3 \left(3(1 - \cos\theta_d) + 4\frac{We}{\sqrt{Re}} \right)$
Clanet et al. [35]	Bilan de masse utilisant la longueur capillaire à l'impact $\beta \sim We^{1/4}$
Roisman [36]	Modèle dynamique avec couche limite visqueuse $\beta \sim 0.87Re^{1/5} - 0.4Re^{-2/5}We^{-1/2}$
Eggers[37]	Même type d'approche que Roisman. Paramètre d'impact P défini par $P = We.Re^{-2/5}$ $\beta = Re^{1/5} f(P)$

TABLE 3 – Différents modèles pour le paramètre d'étalement. Repris de Josserand & Thoroddsen[23]

1.2.4 *Splash!* - Mécanismes supposés et modèles

Un *splash* se définit par l'éjection de gouttes secondaires lors de l'impact. On l'a vu précédemment, deux topologies principales peuvent apparaître : le

prompt splash, pour lequel des gouttes sont éjectées très tôt dans l’impact, et le *corona splash*, pour lequel la lamelle liquide qui s’étale sur la paroi décolle et prend la forme d’une couronne.

Mécanismes physiques autour du *splashing*

Les mécanismes qui différencient ces deux régimes font l’objet de nombreuses recherches, freinées par les échelles de temps et de longueur qui s’y rapportent. En 2012, Thoroddsen et al. [38] observent l’émission de gouttes secondaires lors d’un *prompt splash* d’une goutte millimétrique : avec un diamètre de 6 à 8 μm et une vitesse de 60 à 70 m.s^{-1} , les premières gouttelettes éjectées ont un rapport de taille et de vitesse avec la goutte impactante de l’ordre de 800 et 20, respectivement.

Le rôle de l’air dans le mécanisme de *splashing* a été mis en évidence de façon spectaculaire par Xu et al. en 2005 [39], qui ont pu montrer que réduire la pression du gaz ambiant pouvait permettre la suppression du *splash*. Depuis, différents travaux tentent de savoir quelle est la propriété physique du gaz qui est de première influence sur le *splash*, sans aboutir à un véritable consensus pour le moment.

Le décollement de la lamelle liquide de la paroi et l’émission de gouttes secondaires s’expliqueraient par plusieurs processus. D’une part, un tourbillon se forme au dessus de la lamelle liquide lors de son avancée, qui abaisse la pression et entraîne un effet d’aspiration. Ce tourbillon a notamment pu être visualisé par image de Schlieren par [40] mais n’est pas le seul phénomène impliqué. Lors du décollement, une fine lamelle d’air sépare la paroi de la lamelle liquide. Cette lamelle d’air, dont l’épaisseur est de l’ordre de quelques dizaines à quelques centaines de nm , reste très difficile à observer. Comme son épaisseur est de l’ordre du libre parcours moyen des molécules qui composent l’air, les efforts s’exerçant sur la lamelle liquide sont bien plus importants ($\sim \rho_g c_s V_l$ [41]) que dans le cadre des milieux continus ($\sim \rho_g V_l^2$), et autorisent théoriquement à ces échelles le développement d’une instabilité de Kelvin-Helmholtz. L’existence de cette instabilité est appuyée par les travaux Liu et al [30] : en 2015, les auteurs proposent que l’initiation du *splash* a lieu lorsque le mode de croissance le plus rapide de cette instabilité atteint la taille de la lamelle liquide, ce croisement se produisant après une certaine distance d’étalement. En drainant l’air par des micro-trous à cette position critique, les auteurs parviennent effectivement à supprimer le *splash*, ce qui appuie cette théorie. Néanmoins, aucune visualisation directe de cette instabilité n’a pu être réalisée.

Que ce soit sous l’effet d’une instabilité, ou bien du fait de la présence de très petites rugosités à la paroi (même sous le micron), des points de contacts existent entre la lamelle liquide lévitante et la paroi solide (Fig. 10). Sous l’effet des forces capillaires, ces points de contact s’étendent rapidement et peuvent conduire à l’emprisonnement de bulles d’air. Ces points de contacts pourraient également intervenir dans la création du *splash*.

Le rôle de la rugosité reste difficile à établir : s’il est connu que la présence de rugosités abaisse le seuil de *splashing*, il reste à en démontrer le processus.

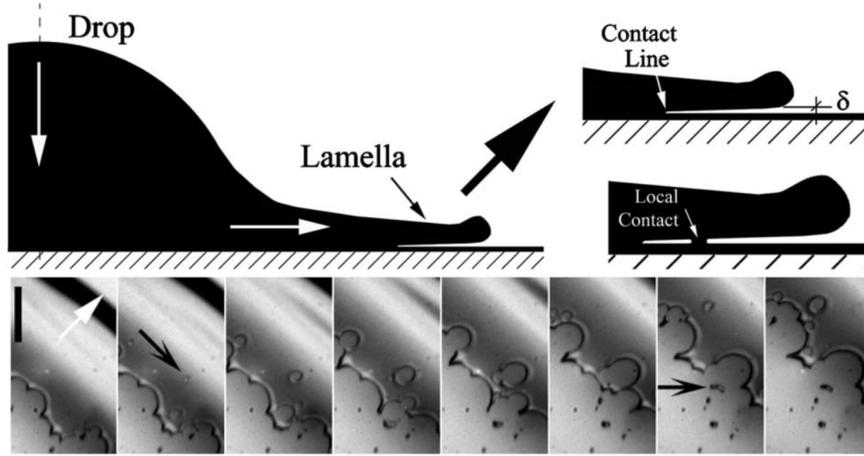


FIGURE 10 – En haut : Schéma en vue de profil de la lamelle lévitant sur un film d’air, suivi d’un contact local à l’avant de la ligne de contact. En bas : Vue expérimentale de la capture de bulles par ce processus. La flèche blanche sur la première image indique le sens du mouvement de la lamelle. La flèche noire sur la seconde image pointe un contact local de la lamelle liquide. La flèche noire sur l’avant dernière image montre la bulle résultante de ce contact. Figure reprise de [42].

En 2017, Hao [43] montre que, tout autre paramètre étant fixé, la taille des rugosités peut conduire à l’obtention de *crown splash*, de *prompt splash*, ou de dépôt (Fig. 11). La distinction dans les deux types de *splash* reste à l’heure actuelle très difficile à expliquer.

Modélisation autour du *splashing*

La modélisation du seuil de *splashing* a longtemps reposé sur le paramètre de *splashing* K [44][45], exprimé comme :

$$K = We\sqrt{Re} \quad (3)$$

Plusieurs valeurs critiques ont pu être proposées, notamment à partir d’études paramétriques expérimentales. En ordre de grandeur, une valeur critique autour de $K_{crit} \sim 3000$ a été fréquemment énoncée dans la littérature. Cependant, la portée de ce paramètre est par essence limitée car il ne prend en compte ni les caractéristiques de la paroi, ni les propriétés du gaz environnant, points pourtant essentiels comme on l’a vu précédemment. En 2014, Riboux et al. donnent un nouvel élan à la modélisation en proposant une théorie se basant sur les forces s’exerçant sur la lamelle liquide [46]. Pour que le *splash* ait lieu, la vitesse ascendante de la lamelle liquide V_v doit contrebalancer la vitesse de rétractation capillaire de Taylor-Culick V_r (formant un bourrelet à l’extrémité de la lamelle), ceci afin d’empêcher le contact entre l’extrémité

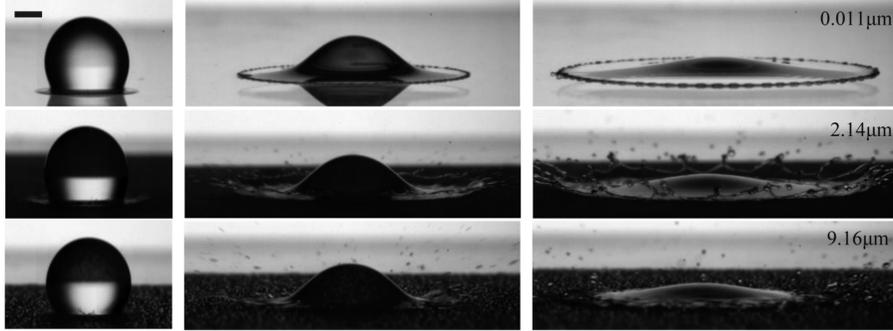


FIGURE 11 – Impact d’une goutte d’eau de 3.2 mm de diamètre à 4.1 m.s^{-1} sur un substrat de rugosité variable. De haut en bas, les valeurs de rugosités moyenne arithmétiques sont $0.011 \text{ } \mu\text{m}$, $2.14 \text{ } \mu\text{m}$, $9.16 \text{ } \mu\text{m}$, et on obtient respectivement un dépôt, un corona *splash* et un prompt splash. Figure reprise de [43].

avant de la lamelle et la paroi. Ainsi le seuil de splash proposé est $V_v/V_r = \beta \sim \mathcal{O}(1)$.

La vitesse d’ascension V_v est obtenue par bilan de force sur la lamelle (d’épaisseur H et de vitesse V), en notant deux contributions verticales : une force d’aspiration sur la partie supérieure de la lamelle, et la force de frottement, particulièrement prépondérante entre la lamelle liquide et la paroi.

$$V_v \sim \sqrt{\mathcal{L}/\rho_\ell H} \text{ avec } \mathcal{L} = K_{visq}\mu_g V + K_{suct}\rho_g V^2 H \quad (4)$$

L’expression de K_{visq} est disponible dans [46]. Elle est établie à partir de la théorie de lubrification, et prend en compte le libre parcours moyen des molécules du gaz ainsi que l’angle formé au point de contact entre la lamelle liquide et la paroi. La seconde contribution K_{suct} est exprimée dans le cadre non-visqueux. V et H désignent respectivement la vitesse et la hauteur de la lamelle au moment de l’éjection.

La vitesse de rétractation capillaire s’exprime par :

$$V_r = \sqrt{2\sigma/\rho_\ell H} \quad (5)$$

Il vient alors l’expression du paramètre β :

$$\beta = \left(\frac{K_{visq}\mu_g V + K_{suct}\rho_g V^2 H}{\sigma} \right)^{1/2} \quad (6)$$

Dans les expressions précédentes, la vitesse V et la hauteur H de la lamelle sont prédites au temps d’éjection T_e par :

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{3}}{2} Re^{-1} \tau_e^{-1/2} + Re^{-2} Oh^{-2} &= 1.21 \tau_e^{3/2} \\ h &= \frac{\sqrt{12}}{\pi} \tau_e^{3/2} \quad v = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\tau_e}} \end{aligned} \quad (7)$$

où $\tau_e = T_e \frac{V_{goutte}}{D_{goutte}}$, $h = \frac{H}{D_{goutte}}$ et $v = \frac{V}{V_{goutte}}$ sont les grandeurs sans dimension associées au temps d'éjection T_e , à l'épaisseur de la lamelle H et à sa vitesse V . On introduit également le nombre d'Ohnesorge $Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho \ell \sigma H}}$.

La suite du mouvement de la lamelle conduisant à l'éjection de gouttes secondaires a été décrit et modélisé dans [47] par Riboux et Gordillo qui ont poursuivi leurs recherches. La Figure 12 est issue de ces travaux et reprend les notations des auteurs. Après l'éjection, le point amont de la lamelle liquide (repéré par le rayon adimensionnel $a(t)$) et le point de décollement de la lamelle (repéré par $a^+(t)$) ne coïncident pas. Sur cette distance, les forces visqueuses ralentissent le liquide et la hauteur de la lamelle augmente. La vitesse et l'épaisseur de la lamelle en ces points à un temps τ sont donnés par :

$$v_a(\tau) = \sqrt{3/\tau} \quad h_a(\tau) = \frac{\sqrt{12}}{3\pi} \tau^{3/2} \quad (8)$$

$$v_a^+(\tau) = v_a (1 - \sqrt{2}/\sqrt{Re} v_a h_a) \quad h_a^+(\tau) = h_a (1 - \sqrt{2}/\sqrt{Re} v_a h_a)^{-1}$$

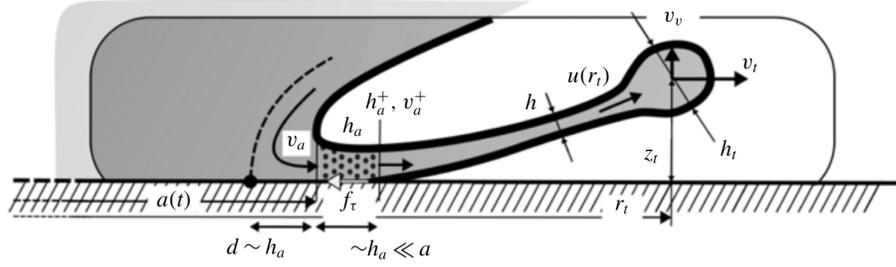


FIGURE 12 – Schéma issu de [47] décrivant la lamelle liquide après son éjection ($T > T_e$), pour un cas de *splash* $\beta > 1$.

Au bout de la lamelle liquide lévitante se détachent des gouttes sous instabilités capillaires et de Rayleigh-Taylor. La comparaison des temps de croissance de ces instabilités permet aux auteurs de montrer que les gouttes éjectées sont de diamètre équivalent à la hauteur de la lamelle en a^+ . Il en va de même pour leur vitesse qui est de l'ordre de la vitesse v_a^+ .

Dans [28], Burzynski et al. comparent la prédiction du modèle de Riboux et Gordillo à leurs expérimentations d'impact sous différents environnements gazeux (Fig. 13). La vitesse radiale d'éjection des gouttes secondaires est correctement prédite par le modèle, tandis que l'angle d'éjection est sous-évalué malgré une tendance correcte - les auteurs attribuent cet écart au fait que la mesure est réalisée légèrement après l'éjection et que les forces aérodynamiques ont pu dévier les gouttes. Enfin, l'écart sur le diamètre moyen prédit est de l'ordre de 7%. Hao et Green [48] appuient également la validité de l'approche de Riboux et al. sur des expériences d'impact sur un substrat ayant une vitesse tangentielle : à l'aide d'une composition des vitesses au niveau de la lamelle

liquide, les auteurs montrent en effet que la formulation du seuil de splashing $\beta \sim 1$ est pertinente.

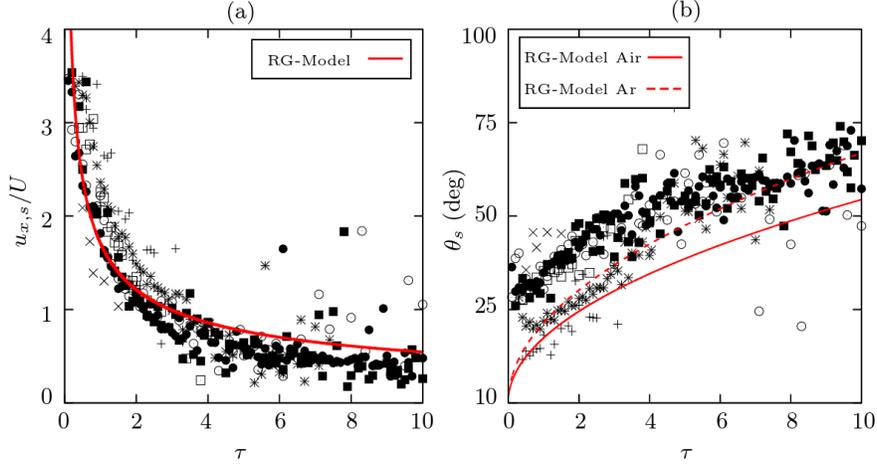


FIGURE 13 – Comparaison des expériences de Burzynski [28] au modèle de Riboux et Gordillo [46]. Goutte d’eau de diamètre $D = 3.7 \text{ mm}$ impactant sur une surface en verre lisse à une vitesse $U = 10 \text{ m.s}^{-1}$ pour 10 environnements gazeux différents. (a) - Comparaison de la vitesse horizontale adimensionnée des gouttes secondaires à l’éjection en fonction du temps adimensionné. (b) - Angle d’éjection des gouttes secondaires. Figure tirée de [28].

Riboux et Gordillo nuancent néanmoins la validité de leur modèle en rappelant que celui-ci a été établi sur des surfaces lisse et partiellement mouillantes (angle contact statique de $\sim 20^\circ$). Il serait également intéressant d’établir la validité de ce modèle sur des cas à fortes vitesses où des effets supplémentaires peuvent apparaître. Burzynski et al proposent également, à partir du modèle de Riboux et al., de corréliser le volume total éjecté au paramètre β défini dans l’équation (6).

$$\frac{V_{eject}}{V_{goutte}} = 3.8\beta^2 - 0.8\beta + 0.026 \quad (9)$$

Si ce polynôme permet de bien représenter leur jeu de données et de dégager une tendance globale d’évolution, il semble difficile d’évaluer quel effet physique est vraiment à l’œuvre; il n’est pas impossible que cette variation reflète en réalité la dépendance du volume éjecté à une partie seulement des forces contenues dans le terme \mathcal{L} . Quoiqu’il en soit, cette dépendance demande des validations complémentaires. De plus, la conclusion des mêmes auteurs sur le rôle de la densité du gaz par rapport à sa viscosité sur le volume éjecté appelle à discussion. Pour établir leurs conclusions, les auteurs se basent sur deux paires d’impacts : deux impacts où ρ_g est fixe mais μ_g varie d’une part, et deux impacts

où ρ_g varie mais μ_g est fixe d’autre part. Le volume éjecté varie fortement dans le second cas et de façon moindre dans le premier. Cependant, dans le second cas, l’un des deux impacts étudiés est sans *splash*, ce qui conduit naturellement à une variation forte du volume éjecté. La forte variation avec la densité sur ce cas est donc potentiellement attribuable au passage d’un seuil critique de *splashing*, et appelle des études complémentaires.

Bref état de la simulation numérique directe du *splash* sur paroi sèche.

La simulation numérique directe de l’impact de goutte sur paroi sèche a longtemps été cantonnée aux régimes exempts de *splash* (dépôt, rebond, rebond partiel). Dans ces régimes, l’enjeu principal est de prendre en compte les interactions à la ligne triple dans la simulation afin de pouvoir correctement prédire la dynamique de l’étalement et le rebond éventuel. Une série de travaux, basés notamment des configurations axisymétriques, ont été publiés depuis la fin des années 2000. On citera le travail de Yokoï et al. [49] qui ont montré par la simulation qu’une situation de rebond ou de dépôt pouvait être obtenue en faisant varier les paramètres des lois d’angles de contact, modélisant les effets à la ligne triple. En 2015 Legendre et Maglio [50] démontrent également que la dynamique d’étalement dépend fortement du choix du modèle traitant la ligne triple, et ajoutent qu’un effort important doit être déployé pour obtenir une convergence en maillage. Nous reviendrons sur le traitement de la ligne de contact dans le Chapitre 3.

La difficulté de la simulation numérique du *splash* provient de plusieurs points. D’une part, le rapport d’échelle important entre la goutte impactante et les échelles auxquelles le *splash* est initié exigent des ressources importantes. A titre d’exemple, mailler une goutte de 1 *mm* avec un pas de maillage de $\Delta = 2 \mu m$, déjà grossier pour le calcul de la lamelle d’air, implique déjà en ordre de grandeur un maillage de plus de 100 millions de points en 3D. Ce type de simulation nécessite donc l’accès à des supercalculateurs, sans quoi seul le cas bidimensionnel peut être envisagé. Ce coût peut également être réduit par des méthodes d’adaptation de maillage, dont l’équilibrage et la gestion mémoire dans le contexte du calcul haute performance peuvent parfois poser de sérieuses difficultés. D’autre part, même pour des impacts à vitesse modérée, de fortes vitesses d’éjection peuvent apparaître (drainage du gaz ou lamelle liquide), mettant à l’épreuve la robustesse des solveurs numériques. Enfin, nous l’avons vu, le phénomène de *splash* sur paroi sèche appelle une physique complexe à différentes échelles, qui nécessiteraient pour une résolution complète plusieurs solveurs couplés (jusqu’à la dynamique moléculaire) ou une modélisation très avancée (on sort alors du cadre de la DNS).

Entre 2016 et 2019, plusieurs simulations novatrices ont abordé le *splash* sur paroi sèche y compris dans le contexte SLD. Dans ces travaux, l’hypothèse incompressible est considérée, sur des cas axisymétriques [51] ou 3D [52][53]. L’équipe de recherche associée à cette thèse apporte également sa contribution dans [54] qui sera détaillée dans ce manuscrit.

Dans [52], Guo et al. obtiennent un *prompt splash* à l’aide de la méthode

MoF (Moment of Fluid) et en utilisant une adaptation de maillage. Une simulation dans le contexte SLD est également proposée (Figure 14) et montre l'obtention d'un *prompt splash*. Sur cette figure, la texture irrégulière de la goutte (même avant l'impact) montre probablement le développement d'instabilités numériques à l'interface, témoin de la difficulté de la simulation. Des gouttes secondaires sont émises mais aucun décollement de la lamelle ne semble se produire : le pas de maillage (625 nm) et l'absence des effets compressibles ou moléculaires sont de bons candidats pour expliquer ce constat.

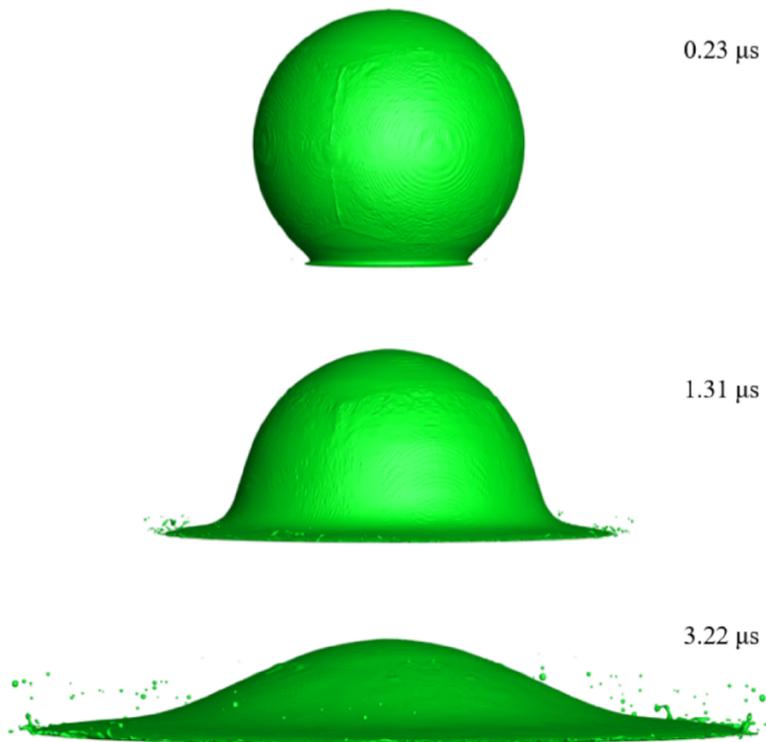


FIGURE 14 – Simulation 3D de l'impact d'une goutte de diamètre $D_g = 200 \mu\text{m}$ une surface lisse à 50 m.s^{-1} dans l'air. Résolution équivalente de 320 cellules par diamètre. Figure tirée de [52].

Sur des cas à plus faibles vitesses et en configuration axisymétrique, Guo et al. [52], tout comme Jian et al. [51] montrent qu'un décollement de la lamelle peut-être obtenu sous effets incompressibles seuls, au prix d'un maillage beaucoup plus fin que sur le cas précédent ($\sim 2000 - 3000$ points par diamètre). De plus les auteurs ne montrent pas le devenir de cette lamelle et aucun *splash* en couronne n'a été observé.

De premières simulations 3D en configuration SLD ont commencé à émerger

dans les dernières années. En dehors du travail de cette thèse, on peut évoquer les résultats publiés par Ciampeanu et al. [53] en 2018. Les auteurs simulent des impacts à 100 mètres par seconde pour différents diamètres de goutte et quelques angles d'incidence. L'originalité de ce travail, en dehors du *challenge* représenté par la réalisation des simulations en elles-mêmes, est la prise en compte d'un écoulement d'air susceptible d'entraîner et de déformer les gouttes avant leur impact. Ciampeanu et al. illustrent par ailleurs l'influence du diamètre de goutte dans l'obtention d'un *splash* (Fig 15). On notera la déformation importante pour la grosse goutte, malgré le fait qu'elle ne soit pas *a priori* soumise à un cisaillement important avant l'impact. De plus, la fragmentation lors du contact n'a pas été soumise à une étude de convergence en maillage (probablement du fait du coût déjà important de pareilles simulations), et appelle des travaux complémentaires.

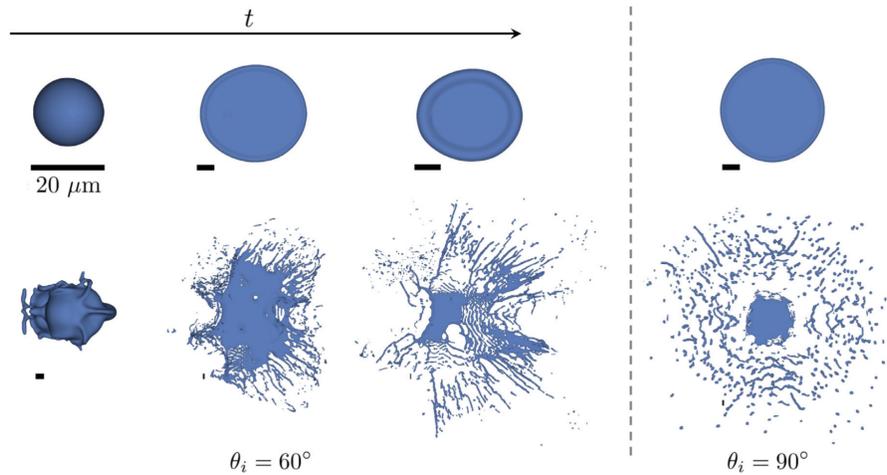


FIGURE 15 – Simulation 3D de goutte à 80 m.s^{-1} pour deux angles d'impacts. La première colonne montre la goutte juste avant l'impact. En haut : goutte de $20 \mu\text{m}$, régime d'étalement. En bas : goutte de $236 \mu\text{m}$, splash sur la paroi. Figure tirée de [53].

1.3 Impact sur film liquide

Dans cette partie, on s'intéresse aux parois mouillées par un film liquide. On distingue ce cas de la paroi sèche, car la présence de liquide sur la paroi induit des mécanismes différents. Ainsi une forme de couronne peut-être facilement obtenue et les phénomènes de désintégration associés se produisent généralement sur des temps plus longs et des vitesses moins importantes. C'est pourquoi ce cas a été plus étudié plus précocement que le cas de paroi sèche.

On présentera d'abord les profils d'impact type en présence de film, puis on détaillera les mécanismes et modèles pour la formation de couronne et l'émission

de gouttes secondaires. Cette section s'appuiera notamment sur la revue proposée par Liang et Mudawar en 2016 [55], et sur quelques travaux publiés depuis.

1.3.1 Paroi mouillée et topologies d'impact.

On considère comme paroi mouillée une paroi, possédant des rugosités (rugosité arithmétique moyenne R_a et échelle de longueur des rugosités L_a), couverte d'une épaisseur liquide de hauteur h . Ces trois grandeurs peuvent être rendue sans dimension en utilisant le diamètre de la goutte D , pour former les paramètres h^* , R_{nd} et L_{nd} :

$$h^* = \frac{h}{D} \quad R_{nd} = \frac{R_a}{D} \quad L_{nd} = \frac{L_a}{D} \quad (10)$$

On intuite aisément que si la hauteur de film est importante par rapport à la taille de la goutte ($h^* \gg 1$), l'impact sera peu influencé par la paroi. Plusieurs classifications ont ainsi été proposées pour définir la nature du régime d'impact : la Table 1.3.1 recense les régimes proposés par Tropea et Marengo en 1999 [56].

Régime	Conditions	Caractéristiques de l'impact
Paroi sèche	$h^* = 0$	Voir section précédente.
Film fin	$L_{nd} < h^* < 3R_{nd}^{0.16}$	Impact dépend des caractéristiques de la paroi
Film liquide	$3R_{nd}^{0.16} < h^* < 1.5$	Faible dépendance aux carac. de la paroi
Eau peu profonde	$1.5 < h^* < 4$	Indépendance aux carac. de la paroi mais dépendance à l'épaisseur du film
Eau profonde	$h^* \gg 4$	Indépendance à la hauteur de liquide

TABLE 4 – Classification des différentes cibles proposées par Marengo [56] en fonction des trois paramètres sans dimension h^* , R_{nd} et L_{nd}

Les différentes bornes proposées dans cette classification ne font pas consensus, en particulier dans le cadre des films fins. On citera notamment les études de Vander Wal et al. [57] qui différencie des comportements d'impact uniquement en se basant sur h^* (même faible), ou de Wang et Chen [58], qui considèrent les films épais sur le critère $h^* > 1$. Néanmoins, les études concordent sur le fait que globalement, sous la barrière $h^* = 1$, les effets de la paroi ne sont pas négligeables.

Si on met de côté les impacts à très faible vitesse, la collision entre la goutte et le film liquide engendre la formation d'une couronne liquide. Les caractéristiques macroscopiques de cette couronne (angle, diamètre, hauteur...) ont été étudiées et sont mesurées quasi-systématiquement dans les études expérimentales. Des

structures secondaires peuvent émerger à différentes étapes de l'impact. Si ces structures émergent dans les premières phases de l'impact (Ejecta), on parlera de *prompt splash* comme pour le cas de la paroi sèche. Si ces gouttes émergent d'une déstabilisation de la couronne par instabilités capillaires, on parlera alors de *delayed splash*. La Figure 16 permet de se familiariser avec les grandeurs dont nous parlerons par la suite, tandis que la Figure 17 donne trois exemples de couronne lors d'impacts sur films.

1.3.2 Formation de la couronne liquide.

Lors de l'impact, le liquide présent dans la goutte subit une redirection rapide de sa vitesse. Il apparaît ainsi un saut de vitesse radiale qui se propage dans le film. En 1995, Yarin et Weiss [61] proposent de décrire ce saut comme une "discontinuité cinématique". Ils bâtissent un modèle quasi-1D (plan 2D réduit en utilisant la hauteur du film) en considérant uniquement les effets inertiels, conduisant aux équations :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial hV}{\partial x} = 0 \quad \frac{\partial hV}{\partial t} + \frac{\partial hV^2}{\partial x} = 0 \quad (11)$$

Les auteurs intègrent l'équation de conservation de la masse sur un volume contenu entre x_1 et x_2 , deux points placés de part et d'autre proche de la discontinuité, qui est elle à la position x_d . Faire tendre x_1 et x_2 vers x_d permet de déduire la vitesse de propagation de la discontinuité $\frac{dx_d}{dt}$. Cette opération peut également être réalisée sur la conservation de la quantité de mouvement pour obtenir une autre expression de cette vitesse qui doit être égale au résultat obtenu avec la première formulation :

$$\frac{dx_d}{dt} = \frac{h_-V_- - h_+V_+}{h_- - h_+} \quad \frac{dx_d}{dt} = \frac{h_-V_-^2 - h_+V_+^2}{h_-V_- - h_+V_+} \quad (12)$$

où les indices - et + désignent les quantités de part et d'autre de la discontinuité. Ces deux égalités ne peuvent être satisfaites que si $V_- = V_+$ ce qui traduit l'absence de discontinuité. Ceci contredit l'existence de la discontinuité, forcée à l'instant initial. Hors, Yarin et Weiss ont également montré à partir de la conservation de la quantité de mouvement seule que si une discontinuité existe à l'instant initial, comme c'est le cas lors d'un impact de goutte, elle perdure dans le temps en se propageant. Cette contradiction ne peut être résolue, dans le cadre incompressible, que si on ajoute un terme source Q_0 dans la conservation de la masse à la position de la discontinuité.

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial hV}{\partial x} = Q_0\delta(x - x_d) \quad \frac{\partial hV}{\partial t} + \frac{\partial hV^2}{\partial x} = VQ_0\delta(x - x_d) \quad (13)$$

En réappliquant la démarche précédente à ce set d'équation, il vient que :

$$\frac{dx_d}{dt} = \frac{1}{2}(V_- + V_+) \quad Q_0 = \frac{1}{2}(h_+ - h_-)(V_- - V_+) \quad (14)$$

Du fait qu'à gauche de la discontinuité (proche de la zone d'impact de la goutte), la vitesse soit plus importante que de l'autre côté (*ie* $V_- > V_+$), le terme source est un terme puits. Ce puits de masse correspond à la formation

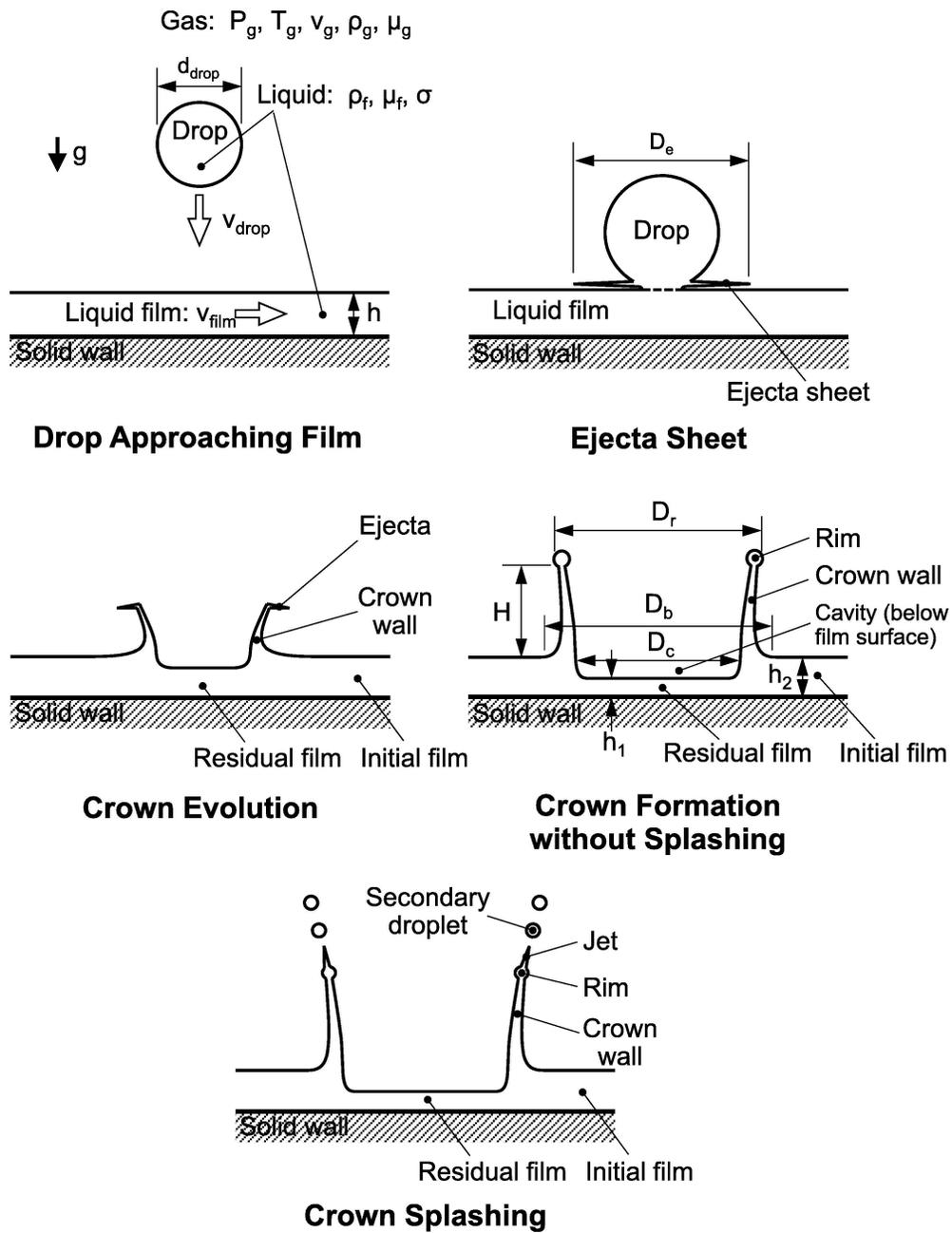


FIGURE 16 – Schématisation des différentes étapes et configurations pouvant apparaître lors de l'impact sur film. Figure tirée de [55].

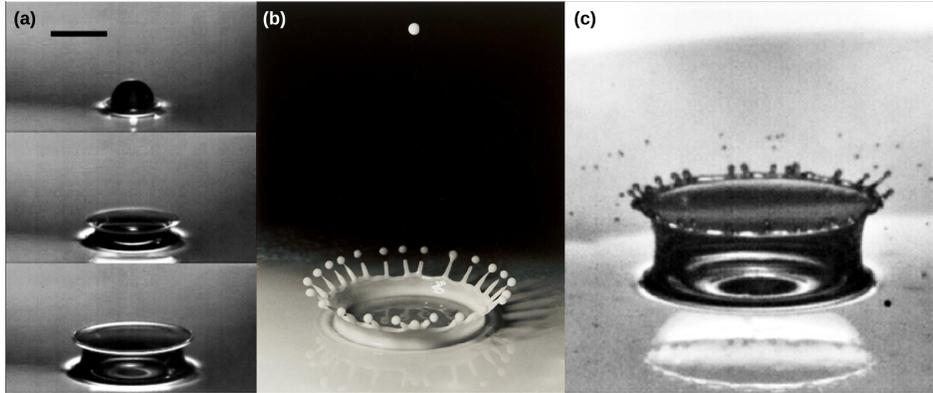


FIGURE 17 – (a) Couronne sans splash, impact d’une goutte d’huile de silicone, $Re = 676$, $We = 428$ [59] (b) Célèbre goutte de lait d’Edgerton (1954) : on distingue la destabilisation de la couronne et l’émission de gouttes secondaires[60] (c) Des gouttes secondaires sont déjà émises avant que la couronne ne soit destabilisée, $Re = 1354$, $We = 874$ [59].

de la couronne.

Ce modèle a par la suite été confronté avec succès à une série d’expériences, et enrichi par plusieurs contributeurs, explorant l’influence de l’épaisseur liquide, de la tension de surface, ou de la viscosité sur la position et les caractéristiques de la couronne. Néanmoins, les effets inertiels pris en compte par Yarin et Weiss [61] restent de premier ordre dans la position de la discontinuité pour la majorité des cas étudiés. Pour la modélisation, on citera notamment les travaux de Trujillo et Lee [62] d’une part, et de Roisman et Tropea [63] d’autre part. Ces derniers ont également proposé une modélisation de la dynamique de la couronne lors de son ascension, jusqu’à son extrémité (bourrelet) - nous y reviendrons. Le modèle de Roisman et Tropea repose sur un bilan de masse et de quantité de mouvement sur la base de la couronne pour en déduire ses caractéristiques (Figure 18). En particulier, son épaisseur et son angle à la base sont donnés par :

$$h_b = h_1 + h_2 \quad \alpha = \arccos \left(\frac{(h_1 - h_2)(v_1 - v_2)^2}{h_b(v_1 - v_2)^2 - 8\sigma/\rho\ell} \right) \quad (15)$$

On notera que ce modèle implique la connaissance de la hauteur de film et la vitesse à l’amont (h_1, v_1) , qui sont difficiles à déterminer. Les travaux de Fedorchenko et Wang [64] montrent que si la hauteur de film est suffisante ($h^* > 0.25$), la couronne émerge verticalement. Pour des films fins, ils proposent une formulation plus simple :

$$\cos(\alpha) = 1 - 4h^* \quad (16)$$

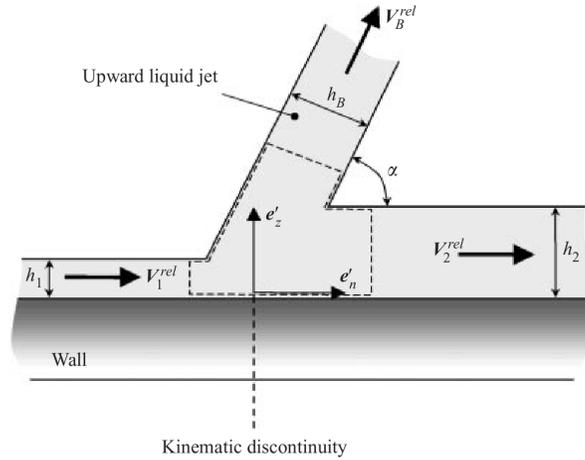


FIGURE 18 – Schématisation du problème issu de Roisman & Tropea [63], les vitesses sont définies dans le repère mobile (e_n', e_τ', e_z') lié à la discontinuité.

1.3.3 Dynamique de la couronne liquide.

Après sa formation, la couronne croît en hauteur et en diamètre. Si son initiation est principalement due aux effets inertiels et bien prédite par les modèles, la suite du phénomène est plus complexe. L'influence des différents paramètres ou forces physiques sur les grandeurs macroscopiques de la couronne dépend du stade d'évolution de l'impact : la gravité est par exemple négligeable pour la formation de la couronne mais contribue à sa décélération et à sa chute. L'influence croisée de la hauteur de film, de la tension de surface, de la vitesse, ou de la viscosité crée un espace de paramètres vaste qu'il est difficile d'explorer au sein d'une étude unique. Ainsi, certaines conclusions peuvent apparaître comme contradictoires au premier abord, mais parce qu'elles se rapportent à des régimes différents. C'est particulièrement le cas pour la hauteur de film pour laquelle l'influence sur le diamètre de la couronne n'est pas nécessairement monotone. A ces difficultés, on ajoute la localisation des points de mesure qui doit être explicitée. Pour une mesure de diamètre de couronne, on peut considérer le diamètre à la base de la couronne, le diamètre maximum, le diamètre sous le bourrelet, le diamètre au dessus du bourrelet... Le choix d'une de ces grandeurs peut conduire à une mesure très différente comme illustré en Figure 19 tirée des travaux de Cossali et al. [65].

Concernant le diamètre de couronne (sous forme sans dimension, noté D^*), une dizaine de corrélations ont été recensées dans la review de Liang et Mudawar [55]. Celles-ci prennent généralement la forme proposée par Yarin et Weiss [61] :

$$D^* = C(\tau - \tau_0)^n \quad (17)$$

où le temps est exprimé sous forme sans dimension τ , et C et n des constantes

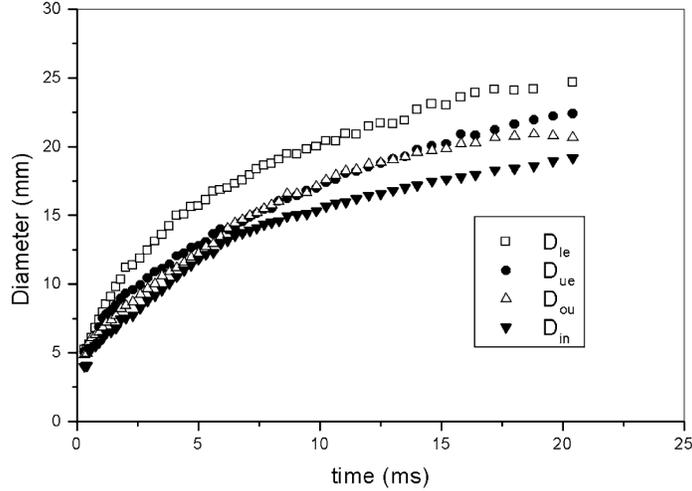


FIGURE 19 – Mesure de différents diamètres de couronne lors d’un impact de goutte par Cossali et al. [65]. Impact d’une goutte d’eau dans l’eau avec $h^* = 0.67$, $We = 667$. D_{in} et D_{ou} désignent respectivement le diamètre intérieur et extérieur de la couronne mesurés expérimentalement depuis une vue de dessous. D_{le} et D_{ue} sont mesurées sur une vue de profil et correspondent respectivement au diamètre extérieur de couronne mesuré à la base, et au diamètre extérieur de couronne mesuré à la base du bourrelet. Figure tirée de [65].

déterminées sur le set d’expérience considéré. L’exposant n est compris entre 0.4 et 0.5 et tandis que C peut avoir des variations plus importantes. Cossali et al [65] proposent par exemple un couple de paramètres pour chacune de leur condition d’impact, permettant une plage de validité plus large. Néanmoins, un modèle englobant un large panel d’expérience et exempt de paramètres d’ajustement essentiels reste encore à établir.

De même, la hauteur de couronne peine à trouver une modélisation valable sur un large spectre d’expériences. L’influence de la gravité (décélération, chute) et de la tension de surface (rétractation, bourrelet) viennent complexifier la tâche. Enfin sur les temps longs, la couronne peut s’incurver, en partie sous l’effet des ondulations capillaires qui s’y propagent, mais dans un mécanisme physique qui reste à éclaircir. En 2018, Sochan et al. [66] illustrent différentes formes de couronne (et de *splash* associés, sur lesquels nous reviendrons) en fonction de l’énergie de l’impact (Figure 20). Sur cette figure, et notamment sur les images (b), (c) et (d), on comprend aisément que le choix du critère de mesure pour la hauteur est capital.

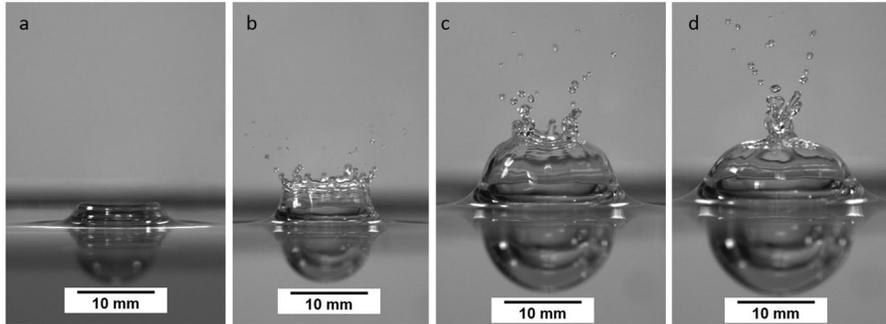


FIGURE 20 – Couronnes formées suite à la chute d’une goutte d’eau de 3.3 mm de diamètre sur eau profonde, lâchée depuis différentes hauteurs. Configurations types obtenues pour des hauteurs de lâché de (a) 0.1-0.2 m, (b) 0.5-1.0 m, (c) 2.0-3.0 m, (d) 5.0-7.0 m. Figure tirée de [66].

1.3.4 *Splash* sur film liquide.

Lors d’un impact sur film de liquide, on distingue deux types d’éjection de liquide.

Lors des premiers instants de l’impact, du liquide peut être éjecté sous forme de structures de petite taille très rapides : on parle de *prompt splash*. Cette éjection de liquide prend la forme d’une fine lamelle liquide qui se forme dans la zone de raccordement entre la goutte et le film liquide et est nommé *ejecta* (Figure 21 - a). Le mécanisme physique conduisant à la formation de l’*ejecta* est encore mal compris. Liang et al. [67] proposent que cette éjection trouve son origine dans la haute pression au moment du contact, mais cette explication mérite des études complémentaires. Plusieurs corrélations ont été proposées dans la littérature pour caractériser la position, la vitesse et le temps d’éjection de l’*ejecta*. Josserand et Zaleski [68] proposent notamment que la vitesse de l’*ejecta* suive la loi :

$$v_e = v_{drop} \sqrt{Re} \quad (18)$$

Si on applique cette prédiction en condition SLD, on obtient un *ejecta* dépassant de façon absurde la vitesse du son. En suivant la corrélation de Zhang et al. [69], l’*ejecta* serait produit quelques centaines de nanosecondes après le contact. La physique de l’*ejecta* dans ces régimes est donc à explorer et se présente comme complexe d’accès.

Plusieurs *scenarii* peuvent se produire après la formation de l’*ejecta*. A haute vitesse, l’*ejecta* est instable et se désintègre en gouttes secondaires (Figure 21 - b). A plus faible vitesse, il garde sa cohérence et peut éventuellement entrer en interaction avec la couronne liquide en formation : soit celui-ci est dévié par elle, soit les deux peuvent fusionner. Observée d’abord par Thoroddsen [70], cette fine lamelle liquide a été reproduite dans de nombreuses simulations et reste un objet d’étude [71]. Zhang et al. [69]

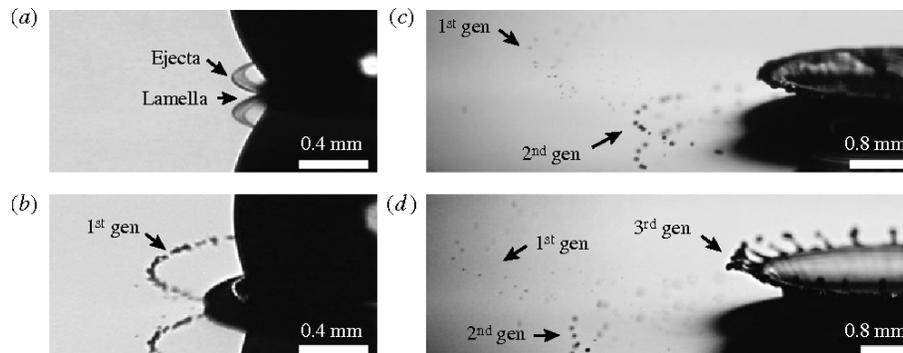


FIGURE 21 – Différentes générations de gouttes secondaires produite lors d’un impact d’une goutte d’huile siliconnée. Figure tirée de [69].

témoignent de situations plus complexes en observant dans le même impact la production de deux *ejectas* qui posent des questions supplémentaires sur les premiers temps de l’impact.

La seconde source de gouttes secondaires est la déstabilisation de la couronne liquide. A l’extrémité de la couronne, un bourrelet se forme sous l’effet des forces capillaires : si aux premiers instants de l’impact, ces forces apparaissent comme négligeables, ce n’est pas le cas par la suite du fait de la décélération de la couronne. Ce bourrelet peut être instable et des jets liquides émergent. Ces jets, instables, se fragmentent et produisent des gouttes secondaires de gros diamètre (Fig. 17 (b-c) et Fig. 21 (d)).

Le mécanisme conduisant à l’émergence de ces jets n’est pas encore parfaitement compris : plusieurs instabilités ont été proposées et certains mécanismes impliquent même des combinaisons de différentes instabilités. Agbaglah et al. [72] formulent un modèle non visqueux validé par simulations 3D pour la génération de jets lors de la rétractation d’une nappe liquide (Fig. 22). Les auteurs montrent que deux instabilités coexistent : aux temps courts, l’instabilité de Rayleigh-Plateau est la seule en présence, mais aux temps plus longs, elle coexiste avec une instabilité de Rayleigh-Taylor. Ce mécanisme pourrait être à l’œuvre dans la déstabilisation de la couronne liquide mais nécessite plus d’étude pour prendre en compte l’influence de la courbure de la couronne. Krechetnikov et Homsy [73] proposent quant à eux que l’émission de jet est initiée dès les premiers instants de l’impact, la forte accélération du liquide pouvant alors entraîner des effets compressibles et une croissance d’instabilités dans un cadre non-linéaire. Néanmoins, les auteurs affirment que c’est l’*ejecta* qui dicte le devenir de la couronne, ce qui ne peut pas être toujours vrai car *ejecta* et couronne ne fusionnent pas toujours.

La nature de ces instabilités n’est pas encore pleinement identifiée et les modèles permettant de prédire le nombre de gouttes secondaires sont peu nom-

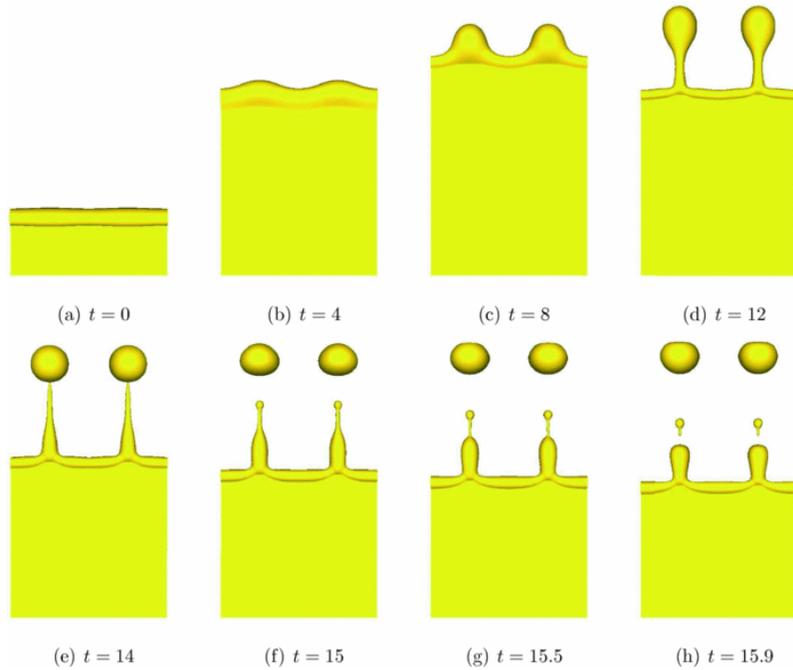


FIGURE 22 – Simulation 3D de la rétraction d’une nappe liquide, jets et émission de gouttes secondaires. $\frac{\rho_\ell}{\rho_g} = 850$, $\frac{\mu_\ell}{\mu_g} = 50$. La situation initiale est une nappe liquide d’épaisseur e avec un bourrelet liquide à son extrémité, initialisé sous forme d’un cylindre perturbé de rayon : $a(x) = a_0 \left(1 + \epsilon \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)\right)$. Ici, $a_0 = 20e$, $\epsilon = 0.05$, $\lambda = 8.5a_0$. Figure tirée de [72].

breux et empiriques. On reprendra le recensement de Liang et Mudawar [55] en citant la corrélation de Cossali et al. [65] $N = C\tau^n$ où des valeurs de C et n sont données pour chaque condition d’impact, ou encore la corrélation d’Okawa et al. [74] $N = 7.84 \times 10^{-6} W e^{1.8} O h^{-0.72} h^{*-0.3}$.

1.3.5 Simulations d’impact sur film en conditions SLD.

Si la simulation numérique directe a globalement abordé plus tôt l’impact sur film que l’impact sur paroi sèche, les configurations hautes vitesses restent dans les deux cas un challenge numérique important. Peu de travaux, récents (publiés depuis 2016), ont porté sur ce type de configurations et utilisent des méthodes numériques avancées pour permettre ces simulations.

En 2019, Cui et al. [75] proposent un cadre original en utilisant la méthode SPH (*Smoothed Particle Hydrodynamics*) pour la simulations d’impacts sur film de gouttes de $50 \mu\text{m}$ à 100m.s^{-1} . Dans les zones à fort gradient de vitesse, il est difficile de garantir une bonne distribution des particules numériques, ce qui pose ensuite des problèmes d’interpolation et de stabilité. Aussi, les auteurs mettent

en place une technique de déplacement de particules, qui permet de garantir la stabilité de la méthode. Si cette approche permet de correctement capter le diamètre de couronne, elle ne permet visiblement pas, malgré des résolutions importantes, de capter l'émission de gouttes secondaires. Plusieurs simulations sont menées et les auteurs montrent en particulier que sur des cas d'impacts rasants, la couronne s'élève faiblement sous l'effet d'une instabilité apparente de Kelvin-Helmholtz qui la rabat vers le film (Figure 23). Cette conclusion avait été dressée par Guo et al. en 2017 [76] qui ont simulé par la méthode Moment of Fluid des impacts de gouttes jusqu'à $200m.s^{-1}$ et montré une absence de *splash* sur des angles très rasants. Leurs travaux montrent également que les tourbillons de Kelvin-Helmholtz se développent à l'intérieur du liquide à l'interface goutte-film au début de l'impact, non sans rappeler les instabilités observées par Thoraval quelques années plus tôt à cet endroit [77].

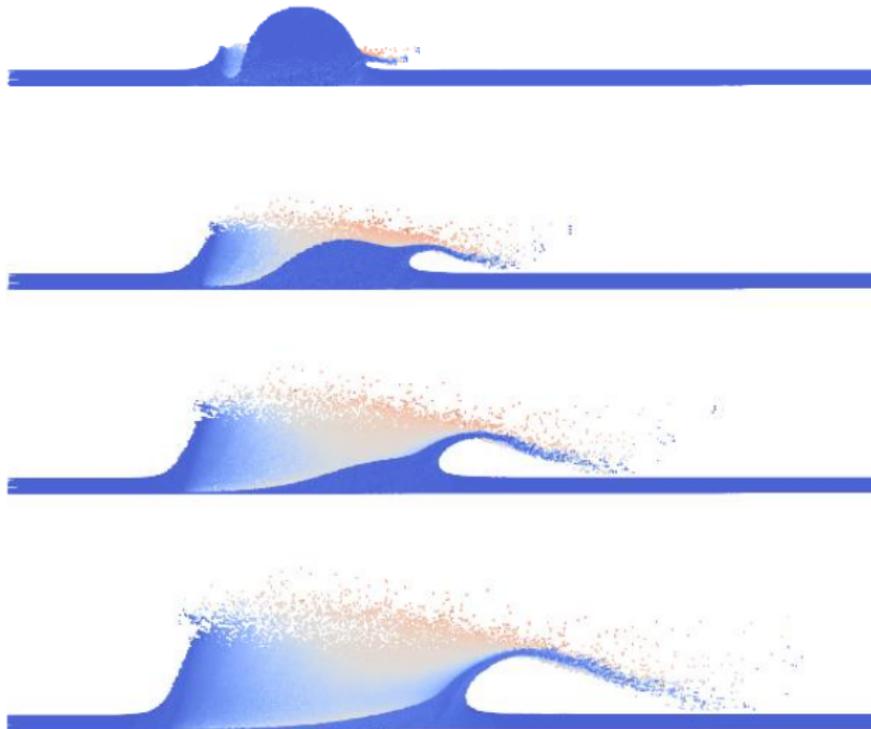


FIGURE 23 – Simulation SPH d'un impact à 45° . Goutte d'eau de $50 \mu m$ à $100 m.s^{-1}$. $h^* = 0.15$. 22 millions de particules SPH sont employées. Figure tirée de [75].

1.4 Travaux déjà réalisés à l'ONERA sur l'impact de SLD

L'ONERA est un acteur de recherche dans la thématique des SLD depuis le début des années 2010. En 2013, le projet PHYSICE voit le jour et dans le comité de suivi se trouvent des membres de la communauté aéronautique, des universitaires et des représentants de l'Etat (DGAC). Ce projet est poursuivi depuis dans une convention renouvelée PHYSICE-II en 2016. Les contributeurs de ce projet ont essentiellement articulé la recherche autour d'une approche théorique d'une part et expérimentale d'autre part. Une approche DNS du problème a débuté en 2016 à travers ce travail de thèse.

L'enjeu de ce projet est double. En premier lieu, celui de l'élaboration d'une loi permettant de prédire la quantité de masse déposée lors d'impacts de gouttes sur un profil d'aile. Cette loi fournirait les données d'entrée nécessaires aux codes d'accrétion de givre. En effet, la prédiction des formes de glace qui s'accumulent, notamment au niveau du bord d'attaque, est un enjeu crucial pour le dimensionnement des systèmes anti-givre. D'autre part, si des gouttes secondaires sont ré-émises lors de l'impact, il est intéressant d'en prédire le diamètre et la vitesse, car celles-ci sont susceptibles d'impacter de nouveau le profil d'aile.

Pour atteindre ces objectifs, les expériences de Papadakis et al. (NASA) [78], réalisées en 2007, constituent une base de données rare pour l'époque en conditions SLD. Plusieurs profils d'aile ont été soumis à un écoulement ensemencé de gouttes colorées, sous différents angles d'incidence. Plusieurs géométries représentatives des formes de givres pouvaient ensuite être encastrées au bord d'attaque du profil d'aile. La quantité de masse déposée est mesurée à l'aide d'un papier buvard épais déposé sur la surface de l'aile (bande blanche visible sur la Figure 24). Au cours de ces essais, la formation de givre a également été étudiée mais nous n'y reviendrons pas ici.

En 2016, Trontin et Villedieu [79] (ONERA) proposent une analyse et un modèle pour le taux de dépôt en paroi ϵ , défini comme le ratio entre la masse déposée lors de l'impact m_{dep} et la masse contenue dans les gouttes impactantes m_{imp} .

$$\epsilon = \frac{m_{dep}}{m_{imp}} \quad (19)$$

Ils notent en particulier que, quel que soit le diamètre des gouttes, deux paliers se distinguent : pour des angles rasants, le taux de dépôt est très faible et augmente avec l'angle d'incidence (défini comme l'angle entre la paroi et le vecteur vitesse de la goutte impactante), jusqu'à atteindre un plateau. Sur des angles importants (impact normal à la paroi), le taux de dépôt semble indépendant de l'angle et plafonne à $\epsilon_\infty = 80\%$. La séparation entre ces deux régimes est marquée par un angle critique $\theta_c \sim 30^\circ$, indépendamment des diamètres de gouttes considérés. Selon les auteurs, la distinction de ces régimes peut s'expliquer par une comparaison qualitative des forces capillaires, inertielles et visqueuses. Lorsque l'impact est normal, la goutte s'étale davantage que pour des impacts rasants ce qui induit une dissipation visqueuse plus importante. Cette dissipation visqueuse pourrait alors conduire à abaisser les effets inertiels au même niveau d'amplitude que les effets capillaires et favoriser une accroche de la goutte. Aussi le



FIGURE 24 – Profil d’aile placé dans la veine d’essai. A gauche, profil propre. A droite : vue rapprochée du bord d’attaque d’un profil d’aile équipé d’une forme de glace en corne. Figure tirée de [78].

modèle proposé pour le taux de dépôt ϵ se base sur une combinaison de ces effets à travers le paramètre de *splash* $K_n = We_n Oh^{-2/5}$, ainsi que sur l’angle d’impact θ :

$$\epsilon = g\left(\frac{\theta}{\theta_c}\right) f\left(\tilde{K}_n = \frac{K_n - K_0}{K_0}\right) \quad (20)$$

avec

$$g\left(\frac{\theta}{\theta_c}\right) = \begin{cases} \frac{\theta}{\theta_c} & \text{si } 0 \leq \theta \leq \theta_c \\ 1 & \text{si } \theta > \theta_c \end{cases} \quad (21)$$

et

$$f\left(\tilde{K}_n\right) = \begin{cases} 1 & \text{si } \tilde{K}_n \leq 0 \\ \frac{\tilde{K}_n^2 + \epsilon_\infty \tilde{K}_n^2}{K_0^2 + \tilde{K}_n^2} & \text{si } \tilde{K}_n \geq 0 \end{cases} \quad (22)$$

où K_0 est le seuil de K_n qui sépare le régime de dépôt du régime de *splash* sur un cas d’impact normal. L’angle critique θ_c est estimé à l’aide du nombre capillaire Ca et du nombre capillaire correspondant au seuil de splash Ca_0 .

$$\theta_c = \theta_0 \tanh \left[\left(\frac{Ca}{Ca_0} \right)^\gamma \right] \quad (23)$$

En pratique, θ_0 , γ , K_0 et ϵ_∞ sont considérés comme des paramètres d’ajustement qui ont été calibrés sur les expériences et les auteurs reconnaissent une part importante d’empirisme dans leur modèle.

Il va sans dire que la nature de la paroi (papier buvard) a été soupçonnée d’influencer le taux de dépôt. Ce soupçon est renforcé par l’étude bibliographique présentée dans les sections précédentes. Pour fournir des données complémentaires, une approche expérimentale a été mise en place à l’ONERA, incluant notamment le montage d’un banc d’essai [80]. Pour le décrire brièvement, ce banc est composé d’un injecteur permettant de générer un train de gouttes de diamètre contrôlé. Les gouttes sont ensuite accélérées dans leur chute à travers un convergent dans lequel un écoulement d’air à haute vitesse circule. Les gouttes impactent enfin une plaque plane inclinable : l’eau restant en paroi ruisselle et tombe dans un réservoir ; la pesée de l’eau collectée permet de remonter au taux de dépôt. La plaque est en aluminium poli qui peut être équipée de papier buvard, ce qui a permis de se confronter aux expériences de Papadakis [78].

Les résultats présentés en Figure 25 confirment que deux régimes existent selon l’angle d’incidence, avec un effet de plateau. La nature de la paroi influence bien le taux de dépôt, et sur la plaque polie, on observe un plateau plutôt autour de $\epsilon = 60\%$. De plus, l’angle critique est plus important ($\theta_c \sim 40^\circ$). On notera que, pour un angle donné, une large plage de valeur de ϵ a été relevée : cette plage de valeur est majoritairement due aux incertitudes expérimentales (mesure et reproductibilité) d’une part, et à la disparité des diamètres et vitesses pris en compte. De ce fait, se lancer dans d’autres analyses deviendrait hasardeux. Notons que ces incertitudes s’illustrent clairement par la présence sur la Figure 25 de points avec $\epsilon > 1$, ce qui est évidemment non physique théoriquement. Notons que l’ONERA s’est doté en 2019 d’une soufflerie givrante qui devrait permettre un meilleur contrôle des conditions expérimentales et une précision plus fine en revoyant l’instrumentation et les méthodes de mesures.

1.5 Bilan, discussion et objectifs de la thèse

1.5.1 Bilan de l’état de l’art

Au cours de ce chapitre, nous avons dressé avec précision le cadre de l’impact SLD. Les différentes plages de paramètres à explorer ont été proposées et constituent un espace de paramètres vaste. La large gamme de diamètre et les fortes vitesses en particulier sont une difficulté majeure pour l’étude, tant au niveau expérimental que numérique. On a également mis en avant une variation non négligeable de certaines propriétés physiques des fluides entre les conditions usuelles en laboratoire (T_{amb}, P_{amb}) et les conditions SLD : la viscosité de l’eau et la densité de l’air subissent notamment des variations importantes. Ce travail a abouti à la création d’une enveloppe délimitant le domaine SLD dans le diagramme Re_ℓ/We_ℓ .

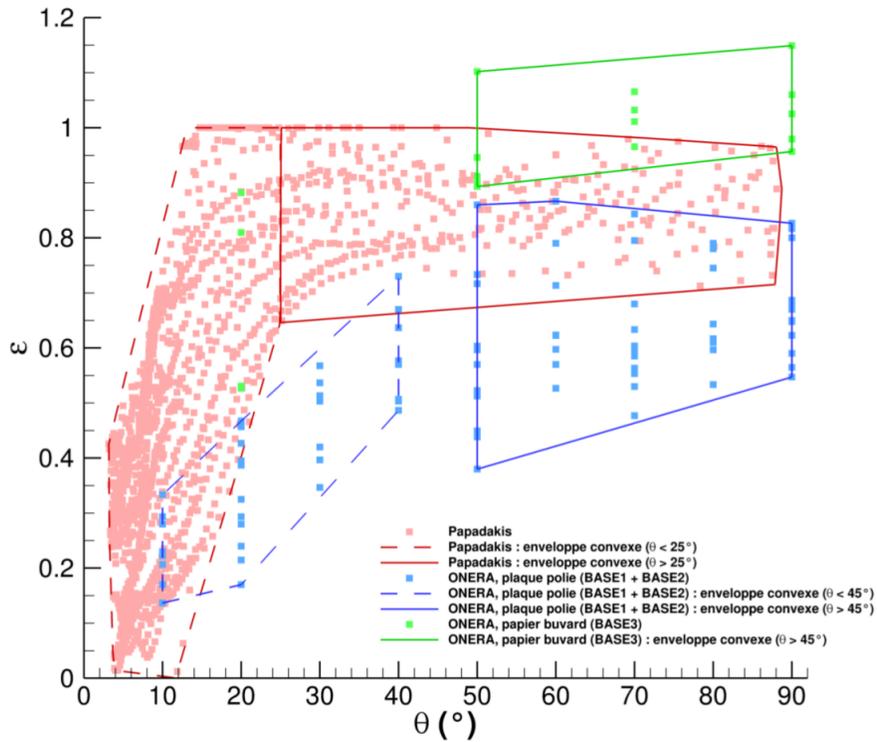


FIGURE 25 – Comparaison des données issues de Papadakis et al. [78] aux expériences menées à l’ONERA. Taux de dépôt en fonction de l’angle d’incidence. Image issue d’un rapport interne, proposée par P. TRONTIN.

Par la suite, nous avons proposé une revue bibliographique sur la compréhension des mécanismes physiques lors de l’impact de goutte sur paroi sèche ou sur paroi mouillée. La formation du *splash* sur paroi sèche implique des phénomènes complexes où des effets incompressibles se combineraient avec des effets dépassant le cadre de la mécanique des milieux continus, et les instabilités sous-jacentes sont encore à préciser. La simulation numérique directe est utilisée depuis quelques années seulement pour aborder ce phénomène en 3D et il n’existe pas à ce jour, à notre connaissance, de simulation convaincante de développement de couronne sur paroi sèche. Sur paroi mouillée, l’émission de l’*ejecta* ainsi que la déstabilisation de la couronne liquide sont encore l’objet d’interrogations ou de controverses. Dans les deux cas, les modèles ont été établis sur des cas d’impacts en dehors du domaine SLD (gouttes millimétriques, vitesse de quelques $m.s^{-1}$). Lors de la revue, on a ainsi formulé quelques commentaires qui questionnent la validité de ces modèles sur notre problématique.

Dans ce contexte, l'ONERA s'est focalisé ces dernières années sur les approches expérimentales et théoriques, en s'intéressant particulièrement au ratio entre la masse qui reste en paroi par rapport à la masse impactante (taux de dépôt). Les études ont pu en particulier montrer une forte dépendance à l'angle d'impact, avec la distinction de deux régimes, ainsi qu'une forte sensibilité à la nature de la paroi.

1.5.2 Objectifs de l'étude et stratégie retenue.

Les récentes mesures de taux de dépôt obtenues à l'ONERA comparées aux résultats de Papadakis et al. (Figure 25) nous interrogent. Deux régimes sont observés et bien qu'une explication qualitative ait été fournie dans [79] en 2016, il reste à en démontrer la validité. La sensibilité à la nature de paroi évoque ce qui a été vu en bibliographie à faible vitesse, où la nature de la cible (matériau, rugosité, présence de film) peut fortement influencer la topologie de l'impact obtenu et les mécanismes sous-jacents. En quoi ces conclusions, comme les mécanismes et modèles établis à faibles vitesses dont on a pressenti les limites, restent-elles valables dans un régime SLD ?

Afin d'étudier finement les mécanismes à l'œuvre au cours de ces impacts à haute vitesse, la simulation numérique directe se positionne comme un outil de premier choix. En effet, sous contrainte de stabilité du calcul (ce qui n'est pas chose aisée dans ces configurations) et de méthodes adaptées aux grands calculs (on y reviendra également), l'accès aux petites échelles de temps ou d'espace est permis. Il reste à définir le modèle physique et à en assurer une résolution numérique valide. Au vu de l'analyse bibliographique résoudre « toute la physique » impliquerait une descente aux échelles moléculaires (notamment sur paroi sèche) et nécessiterait alors de longs (dépassant les délais d'une thèse) travaux de développement pour élaborer une méthode numérique utilisable.

En revanche, l'utilisation de modèles à plus grande échelle peut déjà apporter des éléments de réponse aux questions soulevées plus haut. En particulier, on a vu qu'à basse vitesse, certains mécanismes impliquaient des phénomènes explicables à l'aide des équations de Navier-Stokes incompressibles (formation de couronne sur film liquide, effet d'aspiration de la lamelle lors du splash sur paroi sèche, instabilités possibles de la couronne liquide, ...). L'utilisation d'un code numérique basé sur ces équations peut donc permettre d'étudier ces différentes contributions dans le cadre SLD. Si le code échoue à reproduire certains phénomènes, on pourra alors formuler des hypothèses quant au manque d'une certaine physique et des développements supplémentaires pourront être réalisés de façon plus ciblée. En cela, l'approche retenue se place dans la même optique que les simulations les plus avancées publiées récemment [52][53]. Comme les résultats expérimentaux qui nous intéressent (expériences liées à la mesure du taux de dépôt) ont été réalisés à température ambiante, on ne considèrera pas de changement de phase dans cette étude.

Ces choix ont également été encouragés par la disponibilité du code de calcul DYJEAT, basé sur ce modèle et ayant démontré au cours des dernières

années une bonne robustesse, précision et scalabilité sur des cas d'atomisation. Les configurations d'atomisation (jet liquide, nappe cisaillée, ...) présentent le même type de difficultés numériques (aspect multi-échelle, fort rapport de densité, fortes vitesses) que les cas d'impact de gouttes et font du code un bon candidat pour aborder ce problème.

Plusieurs contributeurs se sont succédés dans le développement du code, et il s'agira donc (en guise de présentation), de fournir une description détaillée de sa version la plus à jour, ceci permettant d'acquérir une maîtrise de l'outil. C'est l'objet du Chapitre 2.

Par la suite, on s'intéressera au comportement du code sur un cas de goutte statique. On verra que les résultats appellent une étude approfondie du fait de l'amplitude importante des courants parasites générés, susceptibles de perturber la simulation d'impact à faible vitesse. Parce que la simulation d'impacts à haute vitesse se profile comme coûteuse, il s'agira également d'améliorer au mieux les performances du code et de continuer le développement de pratiques adaptées au grand calcul. Ces développements numériques seront répertoriés dans le Chapitre 3.

On confrontera ensuite le code à différents cas d'impacts dans des configurations communes de la bibliographie (gouttes millimétriques, vitesse unitaire). Des cas à basses vitesses seront étudiés et il s'agira de choisir, implémenter et valider une méthode pour la prise en compte des effets capillaires en paroi. On simulera également des configurations de *splash*. Ce travail sera présenté dans le Chapitre 4.

Enfin, on traitera à proprement parler des impacts SLD dans le Chapitre 5. L'objectif sera notamment de déterminer l'origine des deux régimes observés par l'expérience. De plus, on s'intéressera au mécanisme de *splashing* sur des configurations à forte vitesse, en étudiant notamment l'influence de l'angle d'impact et de la densité de l'air. Cette étude sera complétée par une approche expérimentale dans laquelle l'auteur a été brièvement impliqué, mais qui permet d'éclairer également le sujet. La simulation permettra également, sur des cas de *splash*, de fournir les caractéristiques des gouttes secondaires et de tester la validité des modèles issus de la littérature.

1.5.3 Quelques points non abordés...

Plusieurs pans de la littérature ont été éludés de l'étude bibliographique et il s'agira ici de les lister en expliquant les raisons de cet écart. Quelques références récentes seront aussi proposées pour élargir la vision du panel de recherche sur l'impact de gouttes.

De nombreuses études récentes s'intéressent à des impacts successifs et montrent que l'interaction entre plusieurs gouttes peut modifier la topologie de l'impact [81][82]. Dans le cas SLD, la densité des nuages de gouttelettes est faible et il est raisonnable de considérer les impacts comme indépendants. En revanche, les films liquides qui peuvent se former sur les ailes (parois chauffées)

sont en mouvement et la surface libre n'est a priori pas lisse (perturbations, ruissellements) : cela peut également avoir une influence sur l'impact [83].

Les rugosités ont été brièvement abordées mais sont également exclues dans notre approche numérique. Nous verrons en effet qu'une partie des expériences réalisées à l'ONERA ont été menées sur une plaque en aluminium polie. En revanche la taille des rugosités du givre est d'ordre comparable à la taille des grosses gouttes, et il est donc fort probable que l'hypothèse d'une cible plane soit à remettre en question. De plus, la rugosité exprimée est en grain de sable équivalent, ce qui n'exclut pas la présence de rugosités en cascade de plus petites tailles susceptible d'intervenir dans l'impact. De même le cas de parois hétérogènes n'est pas considéré.

Les cas d'impacts impliquant plusieurs liquides différents ont également été exclus car cette situation ne se produit pas dans le contexte SLD (impact d'eau sur de l'eau). Ces cas constituent une littérature très vivante ces dernières années. On ne résiste tout de même pas à l'envie de montrer sur ce sujet les visualisations réalisées par l'équipe de Thoroddsen en 2018 (Figure 26), qui démontrent autant la complexité du phénomène d'impact de goutte que son élégance.

Nous n'avons également pas évoqué le changement de phase. Si les transferts thermiques sont très étudiés [84], la plupart des travaux couplant impact et changement de phase concernent l'évaporation, motivés par les applications industrielles (évaporateurs, refroidissement par spray). Sur paroi froide se joue une compétition entre les temps liés à la dynamique d'étalement et la propagation du front de solidification. Thiévenaz et al. [85][86] montrent en 2019 plusieurs formes de givres résultant de cette compétition en faisant varier la température de la paroi (Figure 26). La température de paroi peut également modifier les seuils de *splashing* selon un mécanisme qui n'a, à la connaissance de l'auteur, pas encore été exploré à ce jour.

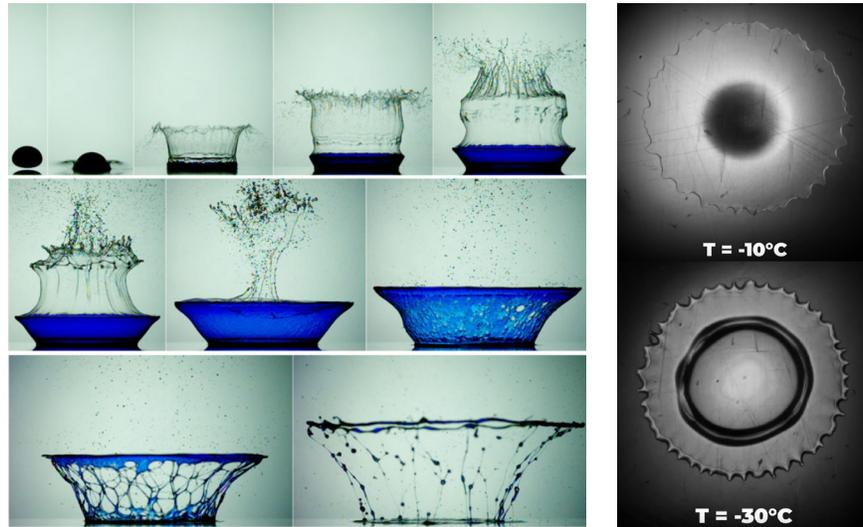


FIGURE 26 – A gauche, impact d’une goutte de glycérine colorée en bleu sur un film d’isopropanol ($D = 5\text{mm}$, $V = 8.13\text{m.s}^{-1}$, $Re_D = 43$, $We_D = 11300$, $h^* = 0.052$). Figure tirée de [87]. A droite, impact d’une goutte d’eau sur une surface métallique à deux températures de paroi différentes. Figure tirée de [86]

2 DYJEAT : Code diphasique de résolution directe des équations de Navier-Stokes incompressibles

Contenu du chapitre

2.1	Préambule	45
2.2	Modèle physique	46
2.3	Méthode numérique pour la résolution	49
2.3.1	Maillage régulier et décentrement des variables.	49
2.3.2	Algorithme de projection dans la description monophasique	50
2.3.3	Conditions aux limites	54
2.3.4	Méthode de suivi d'interface couplée Level Set - Volume of Fluid.	57
2.3.5	Modification du solveur monophasique par la présence d'interface.	63
2.3.6	Intégration temporelle et résumé général de l'algorithme	70
2.4	Conclusion	72

2.1 Préambule

L'analyse de l'état de l'art a montré que la simulation numérique directe représentait un outil intéressant pour progresser dans la compréhension de l'impact de goutte. Si l'objectif à long terme est d'étudier l'impact en conditions givrantes, cela représente un niveau de complexité supplémentaire par rapport à l'impact sans changement de phase qui est, on a pu le voir, loin d'être parfaitement compris.

Le code DYJEAT est développé à l'ONERA depuis le début des années 2000 [88] et propose une résolution directe des équations de Navier-Stokes incompressibles diphasiques, sans changement de phase. Le développement de ce code depuis a notamment été tiré par des problématiques d'atomisation, impliquant un aspect multi-échelle fort et de hauts rapports de densité. Ces développements permettent d'afficher une bonne robustesse et des simulations en pointe sur le sujet.

Depuis les débuts du code, les méthodes employées ont en effet considérablement évolué grâce à une série de contributions : citons notamment le couplage Level-Set et Volume of Fluid pour la représentation de l'interface, l'utilisation de l'adaptation de maillage [89], le traitement robuste et précis des termes advectifs [90], ou l'intégration de méthodes d'interfaces immergées [91]. Il ne s'agira pas dans ce chapitre de détailler l'ensemble des méthodes

disponibles dans le code ni l'historique de leur développement ou de leur abandon, mais de cibler la présentation sur la version disponible en début de thèse, jugée la plus pertinente et la plus aboutie pour aborder les problématiques d'atomisation et d'impact de gouttes.

Le modèle physique, la méthode numérique et la discrétisation seront successivement explicités.

2.2 Modèle physique

On considère un écoulement à deux phases non miscibles qui seront traitées comme des milieux continus (cette approche est valable à faible nombre de Knudsen). La phase à plus forte densité sera désignée comme la phase liquide et ses propriétés seront indicées par un ℓ . La phase gazeuse désignera le fluide de plus faible densité et correspondant à l'indice g .

On adopte une description eulérienne, dans laquelle les propriétés du fluide sont décrites comme des fonctions de l'espace et du temps (\mathbf{x}, t) .

Pour chaque élément fluide, la conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (24)$$

où ρ est la masse volumique du fluide et \mathbf{U} le vecteur vitesse. On fait l'hypothèse de fluides incompressibles : la masse volumique est donc constante et uniforme dans chaque fluide et la conservation de la masse se traduit alors par une divergence nulle du champ de vitesse.

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (25)$$

Résultant du principe fondamental de la dynamique appliqué à un élément fluide, la conservation de la quantité de mouvement s'écrit, en rappelant que la masse volumique est uniforme au sein d'un fluide :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{f} \quad (26)$$

où \mathbf{f} contient l'ensemble des forces volumiques (gravité notamment), et \mathbf{T} le tenseur des contraintes surfaciques. Ce dernier comporte les forces de pression et les contraintes dues à la viscosité et s'écrit en tout point :

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mathbf{D} \quad (27)$$

où \mathbf{I} est la matrice identité, p la pression et \mathbf{D} le tenseur des contraintes visqueuses. Les fluides sont considérés comme Newtoniens : les contraintes visqueuses sont proportionnelles aux déformations via le coefficient μ , la viscosité dynamique :

$$D_{i,j} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (28)$$

Les équations précédentes décrivent le comportement dans chacune des deux phases mais pas à l'interface qui les séparent. Si physiquement, l'interface se caractérise comme une zone de transition entre les deux fluides et a une épaisseur de quelques molécules, on la traitera ici comme une discontinuité, en se plaçant bien au-delà des échelles moléculaires. A cette échelle, les phénomènes doivent donc être modélisés.

Au sein d'un fluide, les molécules interagissent elles entre via des interactions électriques telles que les forces de Van der Waals (qui sont attractives ou répulsives selon la nature des dipôles et l'éloignement entre les molécules). Ces forces sont conservatives, elles dérivent d'un potentiel. Sous l'effet de ces forces, les molécules au sein d'un fluide tendent à se trouver dans un état tel que ce potentiel est minimisé (cela correspond concrètement à une distance optimale avec les molécules voisines). Lorsqu'une molécule se trouve proche de l'interface, elle entre en interaction avec ses homologues de l'autre fluide. Dans le cas de fluides non miscibles, l'énergie associée à ces interactions augmente par rapport au cas d'une molécule au sein de son fluide. Ce différentiel d'énergie correspond macroscopiquement à une force qui tend à minimiser la surface entre les deux fluides : la tension de surface, ou force capillaire. Cette force qui tend à déformer la surface engendre une surpression du côté concave de la surface (et respectivement une dépression du côté convexe). Ce différentiel de pression à la traversée de l'interface est décrit, à l'équilibre, par la loi de Laplace-Young :

$$[p] = \sigma \kappa = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (29)$$

où σ est la tension de surface ($N.m^{-1}$), κ la courbure de la surface, calculée à partir des deux rayons de courbures notés ici R_1 et R_2 . La notation $[.]$ désigne le saut de la quantité considérée à la traversée de l'interface.

La loi de Laplace permet de bien comprendre ce résultat de minimisation de la surface, c'est pourquoi cet état à l'équilibre est souvent utilisé à des fins pédagogiques (pression dans des gouttes de taille différentes, dégonflage d'un petit ballon dans un grand selon des lois tout à fait analogues). Cependant, pour correctement décrire la dynamique, il faut prendre en compte les contraintes de surface qui s'exercent au niveau de l'interface lors de son déplacement. Ainsi l'expression complète s'écrit à l'aide du tenseur des contraintes \mathbf{T} , et des vecteurs normaux et tangentiels à la surface \mathbf{n} et \mathbf{t} :

$$\mathbf{n} \cdot [\mathbf{T}] \cdot \mathbf{n} = \sigma \kappa \quad (30)$$

$$\mathbf{t} \cdot [\mathbf{T}] \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (31)$$

Sous l'hypothèse faite de fluides Newtoniens, ces conditions se traduisent, à la traversée de l'interface, par une continuité de la vitesse tangentielle, mais

par un saut de sa dérivée. En l'absence de changement de phase, la composante normale de la vitesse, que ce soit côté gaz ou liquide, se doit d'être égale à la vitesse normale de l'interface : il y a donc également continuité de la composante normale de la vitesse.

Après avoir décrit les équations au sein de chacune des phases et les conditions à la traversée de l'interface, il reste à décrire les conditions aux limites. Les limites de domaines considérées sont soit une paroi physique, soit une frontière fictive perméable par lequel un fluide peut entrer ou sortir.

On considère le cas d'une paroi physique imperméable. Puisque le fluide ne peut ni sortir ni entrer dans la paroi, sa vitesse normale à la paroi est nulle. Du fait de la condition d'adhérence (fluides visqueux), la vitesse tangentielle du fluide est égale à celle de la paroi. C'est un cas que l'on désignera par la suite comme une paroi non-glissante (*no-slip wall*).

On peut également considérer un glissement sur cette paroi, cas proche d'une symétrie de l'écoulement par rapport à la frontière. Du fait de cette symétrie, la vitesse normale du fluide est nulle (comme pour le cas précédent), et la vitesse tangentielle de part et d'autre de la frontière est identique (on écrit donc une condition de dérivée nulle de la composante tangentielle, donc des contraintes visqueuses, à la paroi). On désignera cette condition comme paroi glissante (*free-slip wall*).

Une entrée de fluide peut également être considérée en imposant un profil de vitesse le long de la frontière (condition type injection). La sortie de fluide peut également s'imposer de cette manière (débit imposé).

Enfin, on peut considérer le domaine comme périodique selon une direction : dans ce cas, tout fluide sortant par une frontière selon la direction choisie entre par la frontière opposée (et réciproquement).

On n'a ici qu'introduit les différentes conditions aux limites et nous y reviendrons de façon détaillée dans la discrétisation des différents termes. En effet, l'imposition d'une vitesse aux limites ne peut se faire numériquement sans un traitement de la pression en cohérence avec la méthode numérique choisie.

Modèle final

Hypothèses : milieu continu - fluides incompressibles - fluides newtoniens - fluides non miscibles - interface d'épaisseur nulle - pas de changement de phase.

$i=\{\ell,g\}$ respectivement pour la phase de plus forte densité et de plus faible densité.

Dans une phase fluide :

$$\nabla \cdot \mathbf{U}_i = 0 \quad (32)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial t} + (\mathbf{U}_i \cdot \nabla) \mathbf{U}_i = -\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i + \frac{\mu_i}{\rho_i} \nabla \cdot (\nabla \mathbf{U}_i + (\nabla \mathbf{U}_i)^T) + \frac{1}{\rho_i} \mathbf{f} \quad (33)$$

Conditions de saut à l'interface :

$$\mathbf{n} \cdot [p_i \mathbf{I} - \mu_i (\nabla \mathbf{U}_i + (\nabla \mathbf{U}_i)^T)]_g^\ell \cdot \mathbf{n} = \sigma \kappa \quad (34)$$

$$\mathbf{t} \cdot [\mu_i (\nabla \mathbf{U}_i + (\nabla \mathbf{U}_i)^T)]_g^\ell \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (35)$$

$$[\mathbf{U}_i]_g^\ell = 0 \quad (36)$$

Conditions aux limites : Paroi non glissante, paroi glissante, périodicité, entrée ou sortie fluide. Voir 2.3.3.

2.3 Méthode numérique pour la résolution

Le modèle physique a été décrit dans la partie précédente, et nous présenterons ici la méthode numérique retenue pour sa résolution. Les développements seront présentés sur un domaine à deux dimensions : le cas 3D s'en déduit aisément selon le même raisonnement et ne sera ici pas décrit afin de ne pas surcharger le manuscrit et ne pas nuire à la fluidité de la présentation. On présentera tout d'abord la méthode de résolution dans le cas monophasique (appliquée dans chacune des deux phases) avant montrer en quoi la prise en compte de l'interface modifie cette approche.

2.3.1 Maillage régulier et décentrement des variables.

Le domaine de calcul est un domaine rectangulaire, discrétisé selon un maillage cartésien structuré et régulier. Chaque cellule de calcul est une cellule carrée numérotée (i, j) , de longueur Δ , défini comme le pas de maillage ou pas d'espace. Ce choix de géométrie permet, outre une plus grande facilité d'implémentation des schémas numériques, d'atteindre de meilleures performances de calcul : on s'affranchit en effet des contraintes des maillages non structurés d'une part (table de voisinage), et l'utilisation de mailles

carrées facilite l'utilisation d'un algorithme multi-grille comme nous le verrons plus loin. Sur ce maillage, les différentes composantes de la vitesse sont décalées par rapport à la position de la variable pression, on parle de maillage décalé ou MAC. Cette représentation est illustré sur la Figure 27.

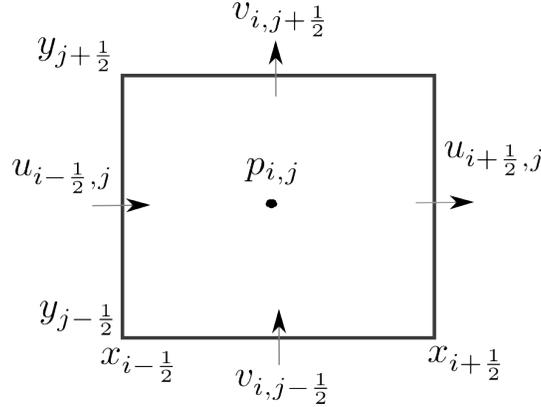


FIGURE 27 – Positionnement des variables sur une cellule de calcul. La variable pression est positionnée au centre de la cellule, et les composantes du vecteur vitesse sont décalés de $\Delta/2$ dans leur direction respective.

Remarque : le code DYJEAT étant écrit en Fortran 90, seuls des indices entiers sont utilisables. Aussi, la composante u positionnée sur la frontière Est de la cellule de pression (notée $u_{i+\frac{1}{2},j}$ sur la Figure 27) est par convention désignée dans le code par $u(i, j)$. Respectivement, $v_{i,j+\frac{1}{2}}$ est désignée par $v(i, j)$.

2.3.2 Algorithme de projection dans la description monophasique

L'algorithme utilisé dans DYJEAT pour la résolution des équations de Navier-Stokes (32) (33) se base sur une méthode de projection. Cette famille de méthodes, développées initialement par Chorin [92] et Temam [93], sont vastement utilisées dans la communauté du fait de leur simplicité d'implémentation sur des maillages décalés, et du respect intrinsèque de la condition de divergence nulle du champ de vitesse.

Le principe repose sur le théorème de Helmholtz-Hodge appliqué au vecteur vitesse. En effet dans un domaine fluide et dans l'hypothèse incompressible, le champ de vitesse est de classe C^1 et il existe donc un champ scalaire ψ et un champ vectoriel \mathbf{A} tels que :

$$\mathbf{U} = \nabla \wedge \mathbf{A} + \nabla \psi \quad (37)$$

Ce qui correspond à une composante solénoïdale (à divergence nulle, d'après les propriétés du rotationnel), et à une composante irrotationnelle (d'après les propriétés du gradient). Appliquer la divergence sur l'équation (37) permet l'obtention d'une équation aux dérivées partielles du second ordre :

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \Delta \psi \quad (38)$$

La méthode de projection consiste à exploiter la décomposition précédente en fragmentant la résolution de l'équation de conservation du moment (33) en deux étapes, permettant ainsi le découplage des variables vitesses et pression. La première étape, appelée étape de prédiction, consiste à la prise en compte de tous les termes hors pression pour obtenir un champ de vitesse intermédiaire \mathbf{U}^* (vitesse prédite) :

$$\mathbf{U}^* = \mathbf{U}^n + \Delta t^n \left(-(\mathbf{U}^n \cdot \nabla) \mathbf{U}^n + \frac{\mu}{\rho} \nabla \cdot (\nabla \mathbf{U}^n + (\nabla \mathbf{U}^n)^T) + \mathbf{f} \right) \quad (39)$$

On a ainsi :

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^* - \frac{\Delta t^n}{\rho} \nabla p^{n+1} \quad (40)$$

En appliquant l'opérateur divergence à cette équation, et comme le champ de vitesse est à divergence nulle (32), on obtient l'équation de Poisson :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\Delta t^n}{\rho} \nabla p^{n+1} \right) = \nabla \cdot \mathbf{U}^* \quad (41)$$

En développant les opérateurs et en écrivant les équations sur les différents points de localisation des variables sur le maillage décalé, la méthode de projection revient ainsi à :

- La résolution explicite de l'équation (39) pour l'obtention du champ de vitesse in termédiaire \mathbf{U}^* - Etape de prédiction

$$\begin{aligned} u_{i+\frac{1}{2},j}^* &= u_{i+\frac{1}{2},j}^n - \Delta t^n \left(u^n \frac{\partial u^n}{\partial x} + v^n \frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \\ &\quad + \Delta t^n \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^n}{\partial y^2} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \\ &\quad + \Delta t^n (f_x)_{i+\frac{1}{2},j} \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} v_{i,j+\frac{1}{2}}^* &= v_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \Delta t^n \left(u^n \frac{\partial v^n}{\partial x} + v^n \frac{\partial v^n}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \\ &\quad + \Delta t^n \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 v^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v^n}{\partial y^2} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \\ &\quad + \Delta t^n (f_y)_{i,j+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (43)$$

- La résolution de l'équation (41) pour l'obtention du champ de pression à l'instant n+1

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right)_{i,j} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j} = \frac{1}{\Delta t^n} \left(\frac{\partial u^*}{\partial x} + \frac{\partial v^*}{\partial y} \right)_{i,j} \quad (44)$$

- La correction (40) du champ de vitesse \mathbf{U}^* pour obtenir le champ à divergence nulle \mathbf{U}^{n+1} - Etape de correction.

$$u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = u_{i+\frac{1}{2},j}^* - \frac{\Delta t^n}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \quad (45)$$

$$v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = v_{i,j+\frac{1}{2}}^* - \frac{\Delta t^n}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \quad (46)$$

Discrétisation du terme convectif $(U^n \cdot \nabla)U^n$

Le terme qui nous intéresse ici, issu de (42), s'écrit pour le transport de la composante u : $\left(u^n \frac{\partial u^n}{\partial x} + v^n \frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j}$. Il s'agit d'en évaluer les dérivées partielles (le traitement pour la composante v est analogue en tout point).

Pour cela, on procède tout d'abord à un décentrement de ce calcul selon le sens de l'écoulement (*upwinding*), ce qui permet l'obtention d'une formulation stable sous critère CFL (on y reviendra). Ce décentrement se traduit par :

$$\left(\frac{\partial u^n}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} \left(\frac{\partial u^n}{\partial x} \right)_{i,j} & \text{si } u_{i+\frac{1}{2},j}^n > 0 \\ \left(\frac{\partial u^n}{\partial x} \right)_{i+1,j} & \text{si } u_{i+\frac{1}{2},j}^n \leq 0 \end{cases} \quad (47)$$

$$\left(\frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} \left(\frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} & \text{si } v_{i+\frac{1}{2},j}^n > 0 \\ \left(\frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} & \text{si } v_{i+\frac{1}{2},j}^n \leq 0 \end{cases} \quad (48)$$

Ces dérivés décentrées sont approximées en utilisant un schéma WENO5 (Weighted Essentially Non-Oscillatory) basé sur un stencil de 6 points, et tiré de [94]. Ce schéma, initialement dédié à la simulation d'écoulements avec chocs, est particulièrement robuste et adapté pour le traitement des termes de transport.

Le principe du schéma WENO est de s'appuyer sur une combinaison de plusieurs discrétisations possibles de la dérivée.

Traisons le cas de la dérivée selon x , décentrée à gauche $\left(\frac{\partial u^n}{\partial x} \right)_{i,j}$.

On bâtit trois discrétisations possibles de cette dérivée basées sur des stencils de quatre points, autour du point (i, j) , que l'on notera D_0, D_1, D_2 . Toutes les variables employées sont à l'indice j et à l'instant n , aussi ces indices seront omis pour la suite de la construction.

$$D_0 = \frac{2}{6}q_1 - \frac{7}{6}q_2 + \frac{11}{6}q_3 \quad D_1 = -\frac{1}{6}q_2 + \frac{5}{6}q_3 + \frac{2}{6}q_4 \quad D_2 = \frac{2}{6}q_3 + \frac{7}{6}q_4 - \frac{1}{6}q_5 \quad (49)$$

avec

$$q_1 = \frac{u_{i-\frac{3}{2}} - u_{i-\frac{5}{2}}}{\Delta} \quad q_2 = \frac{u_{i-\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{3}{2}}}{\Delta} \quad q_3 = \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta} \quad (50)$$

$$q_4 = \frac{u_{i+\frac{3}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta} \quad q_5 = \frac{u_{i+\frac{5}{2}} - u_{i+\frac{3}{2}}}{\Delta}$$

Dans ce schéma, l'approximation finale est construite comme une moyenne pondérée de ces trois discrétisations :

$$\left(\frac{\partial u^n}{\partial x} \right)_{i,j} = \omega_0 D_0 + \omega_1 D_1 + \omega_2 D_2 \quad (51)$$

Dans cette combinaison, les poids ω_0 , ω_1 et ω_2 sont définis en évaluant la régularité des différentes discrétisations (les indicateurs de régularités étant notés IS_0 , IS_1 et IS_2) :

$$\omega_0 = \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2} \quad \omega_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2} \quad \omega_2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2} \quad (52)$$

avec :

$$\alpha_0 = \frac{1}{10} \left(\frac{1}{\epsilon + IS_0} \right)^2 \quad \alpha_1 = \frac{6}{10} \left(\frac{1}{\epsilon + IS_1} \right)^2 \quad \alpha_2 = \frac{3}{10} \left(\frac{1}{\epsilon + IS_2} \right)^2 \quad (53)$$

où ϵ permet d'éviter un dénominateur nul (généralement fixé à 10^{-6}) et les indicateurs de régularités sont définis comme :

$$\begin{aligned} IS_0 &= \frac{13}{12}(q_1 - 2q_2 + q_3)^2 + \frac{1}{4}(q_1 - 4q_2 + 3q_3)^2 \\ IS_1 &= \frac{13}{12}(q_2 - 2q_3 + q_4)^2 + \frac{1}{4}(q_2 - q_4)^2 \\ IS_2 &= \frac{13}{12}(q_3 - 2q_4 + q_5)^2 + \frac{1}{4}(3q_3 - 4q_4 + q_5)^2 \end{aligned} \quad (54)$$

La dérivée décentrée à droite $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1,j}$ peut se discrétiser de la même façon en procédant de façon symétrique. En somme, toutes les formules précédentes sont valables en définissant cette fois-ci :

$$\begin{aligned} q_1 &= \frac{u_{i+\frac{7}{2}} - u_{i+\frac{5}{2}}}{\Delta} & q_2 &= \frac{u_{i+\frac{5}{2}} - u_{i+\frac{3}{2}}}{\Delta} & q_3 &= \frac{u_{i+\frac{3}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta} \\ q_4 &= \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta} & q_5 &= \frac{u_{i-\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{3}{2}}}{\Delta} \end{aligned} \quad (55)$$

La discrétisation du terme $\left(v \frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j}$ est réalisée de la même façon, à ceci près que la vitesse convective $v_{i+\frac{1}{2},j}$ doit être calculée (elle n'est pas définie à cet endroit, voir Fig. 27 pour rappel). Pour cela, on propose une interpolation entre les quatre valeurs voisines, c'est-à-dire :

$$v_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{4}(v_{i,j-\frac{1}{2}} + v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j-\frac{1}{2}} + v_{i+1,j+\frac{1}{2}}) \quad (56)$$

Discrétisation des termes visqueux $\frac{\mu}{\rho} \nabla \cdot (\nabla U^n + (\nabla U^n)^T)$

Les termes visqueux sont discrétisés selon un schéma centré du second ordre.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 u^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^n}{\partial y^2}\right)_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{u_{i+\frac{3}{2},j} - 2u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta^2} + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j-1}}{\Delta^2} \\ \left(\frac{\partial^2 v^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v^n}{\partial y^2}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} &= \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - 2v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{\Delta^2} + \frac{v_{i,j+\frac{3}{2}} - 2v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta^2} \end{aligned} \quad (57)$$

Traitement de l'équation en pression (44)

L'équation en pression est écrite en (i, j) , aussi l'accès à la divergence du champ U^* est immédiat et le second membre se discrétise comme :

$$\frac{1}{\Delta t^n} \left(\frac{\partial u^*}{\partial x} + \frac{\partial v^*}{\partial y} \right)_{i,j} = \frac{1}{\Delta t^n} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j}^* - u_{i-\frac{1}{2},j}^*}{\Delta} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}}^* - v_{i,j-\frac{1}{2}}^*}{\Delta} \right) \quad (58)$$

Pour le terme en pression, une discrétisation standard à cinq points est utilisée (stencil à trois points par direction) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right)_{i,j} &= \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}} \left(\frac{p_{i+1,j}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta^2} \right) - \frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j}} \left(\frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta^2} \right) \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j} &= \frac{1}{\rho_{i,j+\frac{1}{2}}} \left(\frac{p_{i,j+1}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta^2} \right) - \frac{1}{\rho_{i,j-\frac{1}{2}}} \left(\frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta^2} \right) \end{aligned} \quad (59)$$

La matrice obtenue est une matrice creuse à 5 bandes (7 dans le cas 3D). Ce système linéaire est résolu par une méthode de Gradient Conjugué préconditionné par une méthode multigrille (cycle en V). Le détail de la méthode pourra être approfondi en suivant les développements de Couderc [88].

Remarque : dans l'implémentation actuelle, la grille la plus grossière lors du préconditionnement est définie au niveau de la tâche MPI qui traitera alors une grille $2x2$. Des niveaux de grilles supplémentaires pourraient être envisagés en effectuant les communications adéquates et pourraient permettre une réduction du nombre d'itérations nécessaires à la convergence. En l'état, cette étape impose l'utilisation d'un maillage par tâche MPI possédant une puissance de 2 en nombre de cellules par direction pour assurer le bon fonctionnement de l'algorithme.

Discrétisation de l'étape de correction (40).

Une fois la pression établie, la discrétisation de l'étape de correction est immédiate, du fait du décalage vitesse/pression :

$$\begin{aligned} u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} &= u_{i+\frac{1}{2},j}^* - \frac{\Delta t^n}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}} \left(\frac{p_{i+1,j}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta} \right) \\ v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= v_{i,j+\frac{1}{2}}^* - \frac{\Delta t^n}{\rho_{i,j+\frac{1}{2}}} \left(\frac{p_{i,j+1}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta} \right) \end{aligned} \quad (60)$$

2.3.3 Conditions aux limites

Dans cette partie, on précisera l'implémentation des conditions aux limites brièvement décrites dans la sous-section 2.2 et qui seront utilisées au cours de cette thèse.

Les schémas de discrétisation décrits dans les parties précédentes impliquent, pour le calcul d'une dérivée, la connaissance de voisins parfois éloignés. Pour la vitesse, le terme d'advection traité par le schéma WENO5 requiert la connaissance de trois cellules voisines de chaque côté du point d'intérêt. Pour la variable pression, seules les cellules immédiatement voisines sont appelées.

Pour les conditions aux limites, les schémas ne sont pas modifiés. En revanche, le maillage est étendu en dehors du domaine de calcul de sorte à ce que les cellules derrière la frontière du domaine restent accessibles en mémoire (on parle de cellules fantômes). Concrètement, il s'agit donc de définir la valeur de ces cellules de sorte à correctement représenter la condition aux limites choisie.

On numérote de 1 à nx la première coordonnée des cellules de pression en fonction de leur position dans la direction x . Les cellules de pression adjacentes au bord à droite du domaine seront donc les cellules numérotées (nx, j) . Pour prendre en compte les conditions aux limites à cette frontière, il s'agira donc de définir l'ensemble des variables suivantes :

$$\begin{aligned} u_{nx+\frac{1}{2},j}, u_{nx+\frac{3}{2},j}, u_{nx+\frac{5}{2},j}, p_{nx+1,j} & \quad \forall j \in \{1, \dots, ny\} \\ v_{nx+1,j+\frac{1}{2}}, v_{nx+2,j+\frac{1}{2}}, v_{nx+3,j+\frac{1}{2}} & \quad \forall j \in \{1, \dots, ny-1\} \end{aligned} \quad (61)$$

Conditions périodiques Les conditions périodiques sont les plus simples à implémenter puisqu'elles représentent un domaine qui se répète dans l'espace. Autrement dit, si on reprend l'exemple du bord droit :

$$\begin{aligned} u_{nx+\frac{1}{2},j} = u_{\frac{1}{2},j} & \quad u_{nx+\frac{3}{2},j} = u_{\frac{3}{2},j} & \quad u_{nx+\frac{5}{2},j} = u_{\frac{5}{2},j} \\ v_{nx+1,j} = v_{1,j} & \quad v_{nx+2,j} = v_{2,j} & \quad v_{nx+3,j} = v_{3,j} \\ p_{nx+1,j} = p_{1,j} & & \end{aligned} \quad (62)$$

Nous allons à présent nous intéresser aux conditions de glissement et non-glissement. Dans les deux cas, on considère que la paroi est imperméable, ce qui impose une vitesse normale à celle-ci nulle. Dans le cas de la paroi non-glissante, la vitesse du fluide en paroi est égale à la vitesse de la paroi. Dans le cadre de la méthode de projection, on soumet les champs \mathbf{U} et \mathbf{U}^* à ces conditions. Si on écrit la décomposition de Helmholtz-Hodge décrite par l'équation de correction (40) projetée par rapport à la normale à la paroi \mathbf{n}_{BC} , on a :

$$\mathbf{U}^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{BC} = \mathbf{U}^* \cdot \mathbf{n}_{BC} - \frac{\Delta t^n}{\rho} (\nabla p^{n+1}) \cdot \mathbf{n}_{BC} \quad (63)$$

donc, en appliquant la condition d'imperméabilité à \mathbf{U}^{n+1} et à \mathbf{U}^* , on obtient à la paroi :

$$\nabla p^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{BC} = 0 \quad (64)$$

Autrement dit, l'imposition d'une vitesse conduit dans cette méthode à une condition sur le gradient pour la pression (condition de Neumann). On n'évoquera pas ici les choix alternatifs ou la précision de cette proposition, le sujet étant très complexe et discuté dans [95].

Condition de glissement Une condition de glissement consiste à considérer que le fluide glisse sur la paroi sans adhérence. Cette hypothèse peut-être pertinente lorsque la couche limite qui se développe au niveau de la paroi est d'épaisseur négligeable par rapport à la taille de maille Δ . En effet, on rappelle que la composante tangentielle de la vitesse à la paroi est située à une demi-maille de celle-ci (positionnement dans le maillage MAC). Dans ce cas, on réduit l'influence de la vitesse tangentielle dans les cellules fantômes en les fixant par symétrie par rapport à la paroi. La condition d'imperméabilité est toujours vérifiée, donc la vitesse normale est nulle.

On a donc, toujours en prenant l'exemple de la frontière à droite du domaine :

$$\begin{aligned} u_{nx+\frac{1}{2},j} &= 0 & u_{nx+\frac{3}{2},j} &= 0 & u_{nx+\frac{5}{2},j} &= 0 \\ v_{nx+1,j} &= v_{nx,j} & v_{nx+2,j} &= v_{nx-1,j} & v_{nx+3,j} &= v_{nx-2,j} \\ p_{nx+1,j} &= p_{nx,j} \end{aligned} \quad (65)$$

Condition de non-glissement On considère cette fois-ci que la couche limite à la paroi est résolue par le maillage (ou au moins non négligeable). Il faut alors prendre en compte la condition d'adhérence du fluide à la paroi. Dans le cas où la paroi est en mouvement dans son propre plan à la vitesse V_{BC} , on écrit donc $v_{nx+\frac{1}{2},j} = V_{BC}$. On peut approximer grossièrement cette vitesse fluide en utilisant les points dans le domaine et dans les cellules de garde :

$$\begin{aligned} v_{nx+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} &= \frac{v_{nx,j+\frac{1}{2}} + v_{nx+1,j+\frac{1}{2}}}{2} \\ &= \frac{v_{nx-1,j+\frac{1}{2}} + v_{nx+2,j+\frac{1}{2}}}{2} \\ &= \frac{v_{nx-2,j+\frac{1}{2}} + v_{nx+3,j+\frac{1}{2}}}{2} \end{aligned} \quad (66)$$

A partir de cette écriture, on obtient donc les valeurs dans les cellules de garde :

$$\begin{aligned} u_{nx+\frac{1}{2},j} &= 0 & v_{nx+1,j+\frac{1}{2}} &= 2V_{BC} - v_{nx,j+\frac{1}{2}} \\ u_{nx+\frac{3}{2},j} &= 0 & v_{nx+2,j+\frac{1}{2}} &= 2V_{BC} - v_{nx-1,j+\frac{1}{2}} \\ u_{nx+\frac{5}{2},j} &= 0 & v_{nx+3,j+\frac{1}{2}} &= 2V_{BC} - v_{nx-2,j+\frac{1}{2}} & p_{nx+1,j} &= p_{nx,j} \end{aligned} \quad (67)$$

Notons que, dans les deux cas précédents, la condition d'imperméabilité se traduit uniquement $u_{nx+\frac{1}{2},j} = 0$. Nous faisons ici le choix d'étendre cette formulation aux cellules de garde suivantes (*i.e.* sur $u_{nx+\frac{3}{2},j}$ et $u_{nx+\frac{5}{2},j}$) sans appliquer d'effet « miroir », pour des raisons de stabilité du calcul.

2.3.4 Méthode de suivi d'interface couplée Level Set - Volume of Fluid.

Dans cette partie, on s'attachera à décrire la méthodologie mise en place pour décrire l'interface et pour la résolution de son transport. Le traitement des termes de saut sera décrit dans la section suivante.

Plusieurs méthodes sont disponibles pour prendre en compte la géométrie d'une interface. Parmi elles se dégagent des descriptions Eulériennes (citons les méthodes Level Set ou Volume of Fluid, ...) ou Lagrangiennes (Front-Tracking, ...). Chacune de ces méthodes possède ses avantages et ses contreparties et il ne sera pas ici question de les détailler. Si historiquement ces méthodes ont été développées séparément, plusieurs travaux ont proposé des approches hybrides permettant de tirer au mieux parti des avantages de chacune des méthodes. La revue de 2019 de Luo et al. [96] propose un état de l'art de l'utilisation de la méthode Level Set (seule ou hybridée avec d'autres approches) dans le cadre de l'atomisation et pourra constituer une lecture intéressante pour le lecteur désireux de saisir les enjeux actuels.

Le code DYJEAT repose sur une description eulérienne couplant les méthodes Level Set et Volume of Fluid.

Principe de la méthode Level Set.

La méthode Level Set [97] repose sur la fonction éponyme, notée ϕ , définie en tout point comme la distance signée à l'interface. Par convention, on considèrera $\phi > 0$ dans la partie liquide et $\phi < 0$ dans la partie gaz. Ainsi, l'interface est implicitement décrite comme l'isocontour 0 de cette fonction. L'interface est advectée par le champ de vitesse, aussi on soumet ce champ à l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (68)$$

Lors de ce transport, sous l'effet des gradients de vitesse, le champ de ϕ s'éloigne de la distance signée à l'interface. Pour corriger cet écart, on soumet ce champ à une étape de redistanciation (aussi appelée réinitialisation). On utilise un champ temporaire $\psi(\mathbf{x}, \tau = 0) = \phi(\mathbf{x}, t)$ qui va évoluer selon un temps fictif τ . L'information de distance est propagée à partir de l'interface par l'équation :

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t))(1 - \|\nabla \psi\|) \quad (69)$$

Ainsi à l'état stationnaire ($\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = 0$), on a en tout point $\|\nabla \psi\| = 1$. Le champ ψ , après convergence, représente bien la fonction distance. On peut donc poser après convergence $\phi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, \tau \rightarrow +\infty)$. La Figure 28 illustre la nécessité et l'effet de l'opération de redistanciation.

L'utilisation de la fonction Level Set rend aisé le calcul des propriétés géométriques de l'interface. En effet, si ϕ représente la distance à l'interface, alors la normale à celle-ci et le champ de courbure se calculent comme :

$$\mathbf{n} = \nabla \phi \quad \text{et} \quad \kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (70)$$

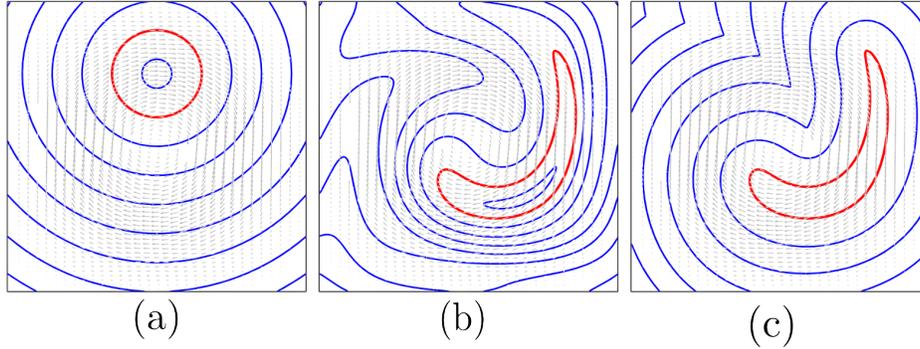


FIGURE 28 – Champ de LevelSet représentant un disque fluide (a) évoluant dans un champ de vitesse tournoyant. Les isocontours de la fonction ne représentent visuellement plus la fonction distance (b). L’application de l’algorithme de redistanciation permet de retrouver cette propriété (c).

En revanche, l’équation (68) n’est pas une équation de conservation. De plus, la résolution numérique de l’équation de redistance (69) peut avoir pour conséquence de déplacer l’interface. De ce fait, la méthode Level Set souffre de défauts dans la conservation de la masse reconnus, notamment dans les zones à forte courbure.

Principe de la méthode Volume of Fluid.

La méthode VoF [98] repose sur la définition, dans chaque cellule, de la proportion en volume de la phase liquide et de la phase gazeuse. Cette variable, bornée entre 0 (cellule entièrement gazeuse) et 1 (cellule entièrement liquide), porte le nom de fonction couleur notée C , et pourra parfois être nommée variable VoF par extension. Sur un volume V , cette grandeur s’écrit :

$$C = \frac{1}{V} \int_V \Gamma(\mathbf{x}) dV = \frac{V_\ell + V_g}{V} \quad (71)$$

où Γ est une fonction indicatrice valant 0 dans le gaz, et 1 dans le liquide. V_ℓ et V_g représentent respectivement le volume liquide et le volume gazeux dans le volume V .

Dans l’hypothèse d’incompressibilité et de non-miscibilité des fluides, l’équation de conservation de la masse se traduit par une conservation du volume de chacune des phases, et donc de cette fonction couleur. L’équation (24) se traduit donc par une équation de transport de la fonction couleur.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla C = 0 \quad (72)$$

Une résolution de cette équation par une approche “classique” de discrétisation conduit à l’étalement de la fonction couleur sur plusieurs cellules et à la perte de la notion d’interface : on parle alors de méthode à interface

diffuse. L'autre approche consiste à reconstruire l'interface dans chaque cellule de façon géométrique (méthode à interface nette).

L'intérêt principal de cette méthode est que l'équation de transport (72) qui la régit équivaut à la conservation de la masse. Ainsi, dans une formulation volumes finis, la masse dans le domaine de calcul sera rigoureusement conservée. La contrepartie principale est la difficulté à déterminer la géométrie de l'interface, dont la courbure, pourtant nécessaire à la prise en compte de la physique à l'interface. La reconstruction de l'interface, si elle est employée, représente également un point critique pour la précision de la méthode.

Couplage Level-Set et Volume of Fluid employé dans DYJEAT. Dans le code DYJEAT, un couplage entre les méthodes Level Set et Volume of Fluid est employé [99][100]. Pour cela, on résout conjointement les équations de transport pour ces variables qui sont colocalisées avec la pression. La méthodologie employée est une méthode de résolution direction par direction (*operator splitting*) telle que décrite dans [99]. Les équations de transport sont écrites sous la forme :

$$\frac{\partial C}{\partial t} - (\nabla \cdot \mathbf{U})C = -\nabla \cdot (\mathbf{U}C) \quad (73)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - (\nabla \cdot \mathbf{U})\phi = -\nabla \cdot (\mathbf{U}\phi) \quad (74)$$

Bien que le terme $\nabla \cdot \mathbf{U}$ soit nul dans l'hypothèse incompressible, on le conserve car il existe dans l'approche directionnelle ; ce terme sera discrétisé de façon implicite, contrairement au second membre qui sera traité explicitement.

Si on considère la direction x , l'équation (73) s'écrit alors :

$$\frac{C^1 - C^n}{\Delta t_s} - \frac{\partial u^n}{\partial x} C^1 = -\frac{\partial (u^n C^n)}{\partial x} \quad (75)$$

où C^1 est une première prédiction suite à l'advection dans la direction x , et Δt_s le pas de temps associé à cette étape (qui, on le verra, n'est pas nécessairement égal à $t^{n+1} - t^n$).

En notant $G^n = G^n(C^n)$ le flux associé au second membre dans une formulation volumes finis, on obtient la discrétisation :

$$\frac{C_{i,j}^1 - C_{i,j}^n}{\Delta t_s} - \frac{u_{i+\frac{1}{2},j}^n - u_{i-\frac{1}{2},j}^n}{\Delta} C_{i,j}^1 = -\frac{G_{i+\frac{1}{2},j}^n - G_{i-\frac{1}{2},j}^n}{\Delta} \quad (76)$$

soit

$$C_{i,j}^1 = \frac{C_{i,j}^n + \frac{\Delta t_s}{\Delta} (G_{i+\frac{1}{2},j}^n - G_{i-\frac{1}{2},j}^n)}{1 - \frac{\Delta t_s}{\Delta} (u_{i+\frac{1}{2},j}^n - u_{i-\frac{1}{2},j}^n)} = P_x(C^n, G^n) \quad (77)$$

On peut ensuite poursuivre en appliquant l'opération équivalente selon la direction y , puis selon z sur le cas 3D. Cependant, il est possible d'augmenter l'ordre de précision de la méthode en permutant l'ordre des directions (*Strang*

splitting, voir [101]). Pour cela, on applique l'opération précédente dans l'ordre qui suit (on donne ici exceptionnellement le cas 3D pour faciliter la mise en pratique) :

$$\begin{aligned}
C^1 &= P_x(C^n, G^n) && \text{avec } \Delta t_s = \Delta t/2 \\
C^2 &= P_y(C^1, G^1) && \text{avec } \Delta t_s = \Delta t/2 \\
C^3 &= P_z(C^2, G^2) && \text{avec } \Delta t_s = \Delta t \\
C^4 &= P_y(C^3, G^3) && \text{avec } \Delta t_s = \Delta t/2 \\
C^5 &= P_x(C^4, G^4) && \text{avec } \Delta t_s = \Delta t/2
\end{aligned} \tag{78}$$

suiivi d'une étape de correction :

$$\begin{aligned}
C^{n+1} &= C^5 - \frac{\Delta t}{\Delta} \left(\frac{C^1 + C^5}{2} (u_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - u_{i-\frac{1}{2},j,k}^n) \right. \\
&\quad + \frac{C^2 + C^4}{2} (v_{i,j+\frac{1}{2},k}^n - v_{i,j-\frac{1}{2},k}^n) \\
&\quad \left. + C^3 (w_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - w_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n) \right)
\end{aligned} \tag{79}$$

Les pas de temps suivants sont effectués de la même façon en permutant les trois directions : on répète ainsi la séquence $(P_x, P_y, P_z, P_y, P_x)$, $(P_y, P_z, P_x, P_z, P_y)$, $(P_z, P_x, P_y, P_x, P_z)$. L'équation de transport pour ϕ (74) est résolue de la même façon et de façon simultanée.

Il reste à définir le calcul des flux notés G^k dans les écritures précédentes. Ce calcul est différencié pour la Level Set et pour le VoF.

Calcul des flux de Level Set et de VoF

Pour les flux de ϕ , on utilise l'extrapolation en temps et en espace proposée dans [102] pour approximer ϕ aux faces. Si on considère le flux dans la direction x sur la face droite $G_{i+\frac{1}{2},j}^k = u_{i+\frac{1}{2},j}^n \phi_{i+\frac{1}{2},j}^k$, on exprime :

$$\begin{aligned}
\phi_{i+\frac{1}{2},j}^k &= \phi_{i,j}^k + \frac{\Delta}{2} \left(1 - u_{i+\frac{1}{2},j} \frac{\Delta t_s}{\Delta} \right) \frac{\phi_{i+1,j}^k - \phi_{i-1,j}^k}{2\Delta} && \text{si } u_{i+\frac{1}{2},j}^n > 0 \\
\phi_{i+\frac{1}{2},j}^k &= \phi_{i,j}^k + \frac{\Delta}{2} \left(1 + u_{i+\frac{1}{2},j} \frac{\Delta t_s}{\Delta} \right) \frac{\phi_{i+2,j}^k - \phi_{i,j}^k}{2\Delta} && \text{si } u_{i+\frac{1}{2},j}^n < 0
\end{aligned} \tag{80}$$

Le calcul des flux de VoF est fait de façon géométrique afin d'éviter toute diffusion numérique de l'interface. On construit le volume entrant ou sortant de la face dans la direction donnée pendant Δt_s , et à partir d'une reconstruction de l'interface, on calcule la portion de chacune des deux phases dans ce volume.

Pour cela, on utilise une reconstruction de type PLIC (*Piecewise Linear Interface Calculation*), qui consiste à approximer l'interface dans chaque cellule par un plan incliné [103]. L'implémentation choisie est celle proposée par Sussman dans [99]. Pour effectuer cette reconstruction, on se place dans une cellule

(i, j, k) et on note l'équation du plan $ax + by + cz + d = 0$. a, b, c sont les coordonnées du vecteur normal unitaire à ce plan pointant côté liquide. d représente la distance du plan par rapport au centre de la cellule. L'orientation de ce plan est réalisée en se basant sur l'information portée par ϕ . On souhaite que, pour la cellule (i, j, k) et pour ses voisines directes, la distance au plan reconstruit soit la plus proche de la fonction ϕ dans ces cellules. Dans le cas 2D, c'est une droite d'équation $ax + by + c = 0$ qui doit être positionnée de la sorte. On minimise ainsi la norme d'erreur :

$$E_{i,j} = \sum_{i'=i-1}^{i+1} \sum_{j'=j-1}^{j+1} w_{i',j'} H'_\epsilon(\phi_{i',j'}) (\phi_{i',j'} - a_{i,j}(x_{i'} - x_i) - b_{i,j}(y_{j'} - y_j) - c_{i,j})^2 \quad (81)$$

où H'_ϵ est un Dirac lissé sur une épaisseur ϵ , et $w_{i',j'}$ les poids attribués aux cellules dans la construction de cette norme d'erreur. En 2D, $w_{i,j} = 16$ tandis qu'à l'ensemble des autres cellules du stencil est attribué le poids 1. En 3D, la cellule centrale a un poids de 52 pour un poids de 1 pour les cellules voisines. L'utilisation du Dirac lissé permet de pondérer le poids des cellules par leur distance à l'interface. Ainsi, les cellules voisines proches de l'interface vont contribuer davantage à l'orientation du plan que les autres cellules, ce qui va contribuer à l'obtention de plans reconstruits plus cohérents entre eux (au sens de leur raccordement). L'épaisseur de lissage ϵ est fixée à $\epsilon = \sqrt{2}\Delta$ dans le cas 2D et $\epsilon = \sqrt{3}\Delta$ en 3D. Minimiser cette erreur en fonction des coefficients de la droite revient à résoudre un système 3x3 (ou 4x4 en 3D, voir [104] pour son écriture), que l'on peut résoudre analytiquement, ou à défaut à l'aide d'une décomposition LU.

La position du plan dans la cellule, qui définit l'interface reconstruite, définit un certain volume de liquide de la cellule. On souhaite que ce volume soit cohérent avec l'information donné par la variable VoF dans cette cellule. Pour cela, on déplace le plan (en modifiant le coefficient d en 3D, ou c en 2D) de sorte à ce que ces volumes correspondent. Le calcul géométrique du volume défini par le plan est réalisé à l'aide de la librairie *VoFtools* présentée dans [105]. Lorsque cet ajustement est effectué, la Level Set dans la cellule est recalculée à partir du plan reconstruit (comme la distance signée à celui-ci). De cette sorte, ϕ , plan reconstruit et C portent des informations cohérentes entre elles.

A partir de cette reconstruction, on calcule géométriquement le flux de C traversant une face. Considérons pour l'exemple la face Est de la cellule (i, j) , illustré dans la Figure 29.

A partir de la vitesse $u_{i+\frac{1}{2},j}$, on délimite le fluide qui va entrer ($u_{i+\frac{1}{2},j} < 0$) ou quitter ($u_{i+\frac{1}{2},j} > 0$) la cellule pendant Δt_s . Le volume correspondant est $\Delta t_s / |u_{i+\frac{1}{2},j}| \times \Delta$. Grâce à la librairie *VoFtools*, on évalue le volume de liquide VOL contenu dans ce volume passant à travers la frontière. Le flux de C est alors défini par :

$$G_{i+\frac{1}{2},j}^k = \frac{VOL |u_{i+\frac{1}{2},j}|}{\Delta t_s \Delta} u_{i+\frac{1}{2},j} \quad (82)$$

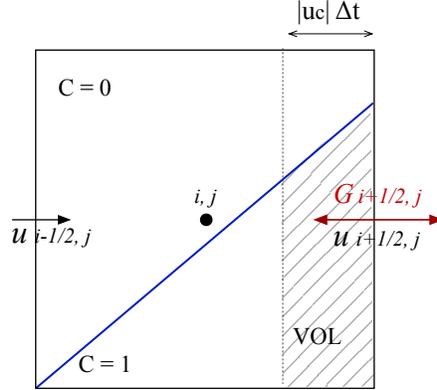


FIGURE 29 – Exemple de calcul géométrique du flux de C quittant la frontière Est. La reconstruction de l’interface est représentée par la ligne continue traversant la cellule.

Réinitialisation de ϕ

Lorsque le champ ϕ^{n+1} est obtenu, à l’issue des 5 passes, il ne représente plus strictement la distance à l’interface en tout point. Cela avait été illustré dans la Figure 28 et est d’autant plus vrai ici que la ϕ proche de l’interface est corrigée lors du couplage avec la variable C . On soumet donc $\phi^n + 1$ à l’équation de redistance (69) rappelée ici :

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t))(1 - \|\nabla \psi\|) \quad (83)$$

Nous reprenons ici la présentation qui avait été faite par Courderc [88] pour l’algorithme de redistance implémenté dans le code DYJEAT. L’équation de redistance peut se ré-écrire sous une forme semi-discrète :

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \hat{H}(D_x^+ \psi, D_x^- \psi, D_y^+ \psi, D_y^- \psi) \quad (84)$$

où \hat{H} est l’Hamiltonien numérique et où $D_x^+ \psi$, $D_x^- \psi$, $D_y^+ \psi$, $D_y^- \psi$ sont des approximations WENO5 des dérivées amont et aval de ψ en (i, j) . Le traitement de ces dérivées ne sera pas détaillé ici car il suit la formulation qui avait été exprimée pour l’advection de la vitesse dans les équations (49) à (55).

Le calcul de \hat{H} est réalisé en employant un flux de Godunov défini comme :

$$\begin{aligned}\hat{H}(a, b, c, d) &= S_0 \left(\sqrt{\max((a^-)^2, (b^+)^2) + \max((c^-)^2, (d^+)^2)} - 1 \right) \quad \text{si } S_0 \geq 0 \\ \hat{H}(a, b, c, d) &= S_0 \left(\sqrt{\max((a^+)^2, (b^-)^2) + \max((c^+)^2, (d^-)^2)} - 1 \right) \quad \text{si } S_0 < 0\end{aligned}\tag{85}$$

où S_0 approxime le terme $\text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t))$: pour des questions de stabilité, un lissage est employé et on exprime ce terme comme :

$$S_0 = \frac{\phi_{i,j}}{\sqrt{(\phi_{i,j})^2 + \Delta^2}}\tag{86}$$

La discrétisation temporelle de l'équation de redistance suit un schéma de Runge-Kutta 2 qui ne sera pas développé ici (voir 2.3.6). L'équation de redistance peut être écrite comme une équation de convection hyperbolique pour laquelle la vitesse de convection est unitaire : de ce fait, pas de temps et pas d'espace peuvent se confondre dans l'écriture, et on choisit le pas de temps $\Delta\tau = \Delta/2$.

Théoriquement, des itérations de redistance doivent être réalisées jusqu'à atteindre l'état stationnaire pour garantir $\|\nabla\phi\| = 1$. Cependant, réaliser un grand nombre d'itérations peut représenter un coût important, et conduire à un déplacement significatif de l'interface du fait de la discrétisation. Aussi, un compromis empirique mis en place est de réaliser trois itérations de redistance chaque fois que cette équation est résolue.

2.3.5 Modification du solveur monophasique par la présence d'interface.

Dans cette partie, on décrira les modifications apportées au solveur monophasique dues à la présence de l'interface.

Advection de la quantité de mouvement dans les cellules mixtes

Au sein d'une phase, la résolution des termes advectifs de l'équation (39) est basée sur une discrétisation à l'aide de schémas WENO décrits à travers les équations (49) à (55). Ce type de discrétisation souffre de problèmes de stabilité numérique en cas de rapports de densité et de cisaillement élevés entre phases. En effet, d'énormes vitesses parasites peuvent apparaître près de l'interface, conduisant à des résultats non physiques ou, pire, à un calcul divergent.

Une des raisons peut venir de la résolution de l'équation de prédiction (39) en terme de vitesse plutôt qu'en terme de quantité de mouvement. Comme la vitesse est continue à travers l'interface, cette approche évite la discrétisation de la discontinuité de la densité interfaciale. Comme aucune conservation de quantité de mouvement n'est imposée, des techniques spéciales doivent être utilisées pour préserver la stabilité du calcul : des vitesses précises proches de l'interface doivent être définies par une technique d'extension (Nguyen et al.

[106]) afin d'éviter des erreurs de transfert de quantité de mouvement (Sussman et al. [107], Xiao [108]).

La deuxième raison vient de l'emplacement décalé de la grille. Les fonctions indicatrices de phase et la pression sont situées au centre des cellules, tandis que les composantes de vitesse se trouvent sur les faces des cellules (maillage MAC), ce qui conduit à des volumes de contrôle non coïncidents pour les équations de continuité et d'inertie. Rudman [109] a mis en évidence les erreurs numériques résultant de cette situation particulière, étiquetant comme « incohérentes » les équations de masse et d'impulsion résolues chacune sur son propre volume de contrôle. En effet, il n'existe aucune relation entre les flux de masse et de quantité de mouvement car ils ne sont pas définis sur les mêmes faces. Le même problème a été identifié ensuite par Raessi & Pitsch [110], Ghods & Herrmann [111] et Owkes & Desjardins [112], chacun proposant une solution.

Dans DYJEAT, une approche originale, inspiré par les travaux de Rudman [109], Ghods & Herrmann [111] et Vaudor et al. [113], a été développée et testée avec succès [90][114] et sera désignée ci-après comme méthode CMOM (Conservative MOMentum). La principale caractéristique de la méthode est de résoudre sur chaque volume de contrôle de vitesse une équation de conservation de moment ainsi qu'une équation supplémentaire de conservation de la masse pour obtenir une densité prédite cohérente avec la solution de l'équation de quantité de mouvement (87). La discontinuité de densité dans l'équation de la quantité de mouvement est traitée par approche grâce à l'approche PLIC de la même façon que la masse : en pratique, les flux de masse transportent en même temps la quantité de mouvement associée.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) &= 0 \\ \frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) &= \nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{f} \end{aligned} \quad (87)$$

Considérons pour l'exemple le traitement de la cellule de vitesse construite autour de la composante $u_{i+\frac{1}{2},j}$. On traite le cas de la face Est. La vitesse convective en ce point est estimée par interpolation des deux vitesses voisines : $u_{i+1,j} = 0.5(u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{3}{2},j})$. Selon le signe de cette vitesse convective, on construit ensuite un volume entrant ou sortant de cette cellule en s'appuyant sur la reconstruction dans la cellule $(i+1, j)$, sans difficulté supplémentaire par rapport à ce qui avait été fait pour la masse. Il reste à attribuer au flux de masse calculé une vitesse. Pour cela, on ne choisit pas la vitesse calculée précédemment mais une vitesse calculée par extrapolation à partir du point le plus proche du centre du volume. Si $u_{i+1,j} > 0$, alors la vitesse choisie sera :

$$u_{mom} = u_{i+\frac{1}{2},j} + \left(\frac{\Delta}{2} - \frac{u_{i+1,j} \Delta t}{2} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \quad (88)$$

La dérivée est approchée à partir des discrétisations voisines :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} = f \left(\frac{u_{i+\frac{3}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta}, \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta} \right) \quad (89)$$

où f est un limiteur de pente qui améliore la stabilité de la méthode. On choisit généralement le limiteur Superbee [115] pour ce calcul, bien que la comparaison à d'autres limiteurs n'ait pas montré d'influence significative de ce choix. On notera que loin de l'interface (à une distance de 3Δ ou plus), on calcule cette vitesse à partir de schémas WENO5 comme dans le cas monophasique, pour plus de précision.

Le flux sur la face nord obéit au même principe, à ceci près que la face nord de la cellule $u_{i+\frac{1}{2},j}$ chevauche pour moitié la face nord de la cellule de pression (i, j) et celle de la cellule $(i + 1, j)$, et chacune de ces deux cellules possède son interface reconstruite. Pour calculer les flux de masse et de quantité de mouvement, on scinde donc le volume géométrique en deux et on applique la méthode précédente à chacun des deux volumes, dans lesquels il n'y a qu'une seule interface reconstruite [113].

Le calcul des flux de quantité de mouvement a été exposé. Néanmoins, la formulation de la méthode de projection ne fait pas intervenir directement cette variable (on travaille avec le couple (\mathbf{U}, P)). L'algorithme d'advection complet consiste donc à construire les différentes composantes de la quantité de mouvement sur les cellules de vitesses, à faire le bilan des flux de quantité de mouvement, puis à revenir à la variable vitesse

$$(\rho u)_{i+\frac{1}{2},j}^n = \rho_{i+\frac{1}{2},j}^n u_{i+\frac{1}{2},j}^n \quad (90)$$

$$\rho_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = \rho_{i+\frac{1}{2},j}^n - \Delta t \sum_{faces} G_{face} \quad (91)$$

$$(\rho u)_{i+\frac{1}{2},j}^{**} = (\rho u)_{i+\frac{1}{2},j}^n - \Delta t \sum_{faces} (G_{face} u_{mom,face}) \quad (92)$$

$$u_{i+\frac{1}{2},j}^{**} = (\rho u)_{i+\frac{1}{2},j}^{**} / \rho_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} \quad (93)$$

où u^{**} est la vitesse intermédiaire obtenue après l'ajout à u^n des termes advectifs, et G_{face} le flux de masse à travers la face considérée.

Il reste donc à définir la masse volumique sur les cellules de vitesse mixtes. Pour rappel, nous travaillons dans une formulation volume fini, donc avec des valeurs intégrales sur les différentes cellules qui sont les volumes de contrôles sur lesquels les équations bilans sont établies. Il vient alors que, sur la cellule de vitesse en $(i + \frac{1}{2}, j)$:

$$\rho_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\rho_\ell V_{\ell,(i+\frac{1}{2},j)} + \rho_g V_{g,(i+\frac{1}{2},j)}}{V_{\ell,(i+\frac{1}{2},j)} + V_{g,(i+\frac{1}{2},j)}} \quad (94)$$

avec $V_{\ell,(i+\frac{1}{2},j)}$ et $V_{g,(i+\frac{1}{2},j)}$ les volumes de liquide et de gaz contenus dans cette cellule. Le lien avec la variable C est immédiat, néanmoins celle-ci n'est pas connue directement dans les cellules de vitesse, et se risquer à une interpolation

amènerait la perte de précision associée à une diffusion de la densité, et donc de l'interface. On se base donc de nouveau sur la reconstruction de l'interface pour calculer de façon géométrique ces différents volumes. Pour cela, il est commode de procéder à un redécoupage du maillage et de calculer la variable C sur un maillage deux fois plus fin, en suivant [109] (Figure 30). Les calculs sur chacune des sous-maillages sont réalisés à l'aide de *VoFtools*, et la masse volumique sur les cellules de vitesse est alors obtenue par moyenne.

$$\rho_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{4} \left(\rho_{i+\frac{1}{4},j+\frac{1}{4}} + \rho_{i+\frac{3}{4},j+\frac{1}{4}} + \rho_{i+\frac{1}{4},j-\frac{1}{4}} + \rho_{i+\frac{3}{4},j-\frac{1}{4}} \right) \quad (95)$$

$$\rho_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left(\rho_{i+\frac{1}{4},j+\frac{1}{4}} + \rho_{i+\frac{1}{4},j+\frac{3}{4}} + \rho_{i-\frac{1}{4},j+\frac{1}{4}} + \rho_{i-\frac{1}{4},j+\frac{3}{4}} \right) \quad (96)$$

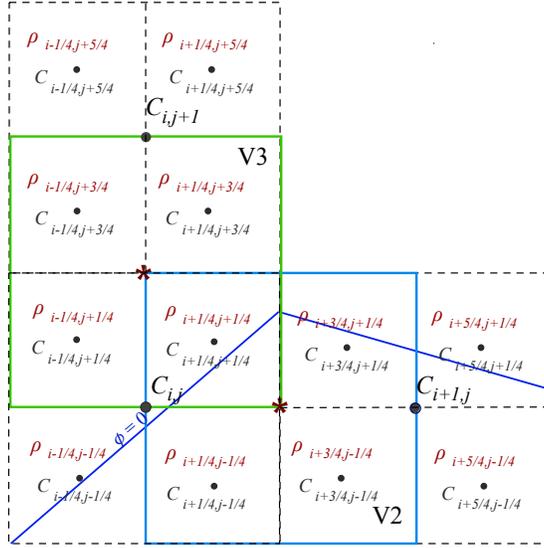


FIGURE 30 – Décomposition en sous-maillages pour le calcul de la masse volumique dans les cellules de vitesse : volume V2 pour la composante $u_{i+\frac{1}{2},j}$ et V3 pour la composante $v_{i,j+\frac{1}{2}}$

L'intérêt de la méthode est particulièrement visible sur les cas de simulations à fort rapport de densité. Plusieurs cas test ont été proposés par Zuzio et al. [114]. On présente en Figure 31 les résultats de la simulation de l'advection d'une goutte 3D à rapport de densité $\rho^* = 10^6$. La tenue de la goutte n'est obtenue qu'avec l'emploi de la méthode CMOM.

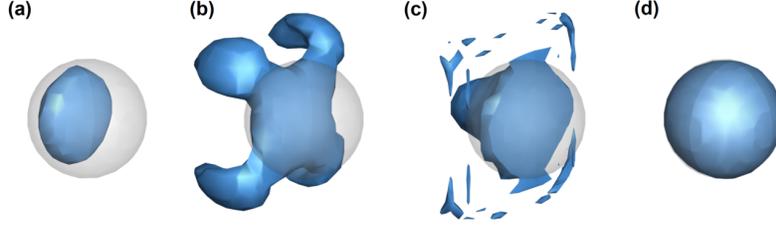


FIGURE 31 – Advection d’une goutte dans un domaine périodique après un tour. La sphère grise représente la condition initiale. (a) : Simulation Level-Set. (b) : Simulation Level-Set avec correction de contours. (c) : Simulation CLSVOF. (d) Simulation CMOM. Résolution $\Delta^* = \frac{D}{\Delta} = 10$; $\frac{\rho_\ell}{\rho_g} = 10^6$.

Termes visqueux à l’interface.

L’écriture de la contribution visqueuse sous la forme (57) sous-tend une uniformité de la viscosité lors de la discrétisation. Cependant, ce n’est plus vrai à la traversée de l’interface car la valeur de μ subit un saut. En suivant les développements de Sussman *et al.* dans [107], on écrit la contribution visqueuse pour chacune des composantes de vitesse, dans une formulation volumes finis :

$$\begin{aligned}
 (\nabla \cdot 2\mu \mathbf{D})_{i+\frac{1}{2},j} \cdot \mathbf{e}_x &= \frac{1}{\Delta} \left(\begin{array}{l} (2\mu \frac{\partial u}{\partial x})_{i+1,j} - (2\mu \frac{\partial u}{\partial x})_{i,j} \\ + \frac{1}{\Delta} \left[\begin{array}{l} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \\ - \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} \end{array} \right] \end{array} \right) \quad (97)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\nabla \cdot 2\mu \mathbf{D})_{i,j+\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{e}_y &= \frac{1}{\Delta} \left[\begin{array}{l} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \\ - \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \end{array} \right] \\
 + \frac{1}{\Delta} &\left(\begin{array}{l} (2\mu \frac{\partial v}{\partial y})_{i,j+1} - (2\mu \frac{\partial v}{\partial y})_{i,j} \end{array} \right) \quad (98)
 \end{aligned}$$

En rappelant l’expression du tenseur des taux de déformations \mathbf{D} :

$$D = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (99)$$

Intéressons-nous à la composante u , le développement pour la composante v étant analogue. Il s’agit d’évaluer les flux sur les faces de la cellule. Pour la direction x , on propose :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1,j} = \frac{u_{i+\frac{3}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta} \quad \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta} \quad (100)$$

$$\mu(\Gamma) = \frac{\mu_g \mu_\ell}{\mu_g \theta(\Gamma) + \mu_\ell (1 - \theta(\Gamma))} \quad (101)$$

où θ est une fonction permettant l'interpolation de μ à partir de la Level Set, avec ici :

$$\theta_{i+1,j} = \frac{\phi_{i+\frac{3}{2},j}^+ + \phi_{i+\frac{1}{2},j}^+}{|\phi_{i+\frac{3}{2},j}^+| + |\phi_{i+\frac{1}{2},j}^+|} \quad \theta_{i,j} = \frac{\phi_{i+\frac{1}{2},j}^+ + \phi_{i-\frac{1}{2},j}^+}{|\phi_{i+\frac{1}{2},j}^+| + |\phi_{i-\frac{1}{2},j}^+|} \quad (102)$$

où l'exposant + désigne ici la partie positive (*i.e.* $\phi_{i+\frac{1}{2},j}^+ = \max(\phi_{i+\frac{1}{2},j}, 0)$). Les valeurs de ϕ sur les cellules de vitesse sont construites par simple interpolation à partir des voisins directs, avec pour l'exemple $\phi_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2}(\phi_{i+1,j} + \phi_{i,j})$.

Les flux sur les faces Nord et Sud sont construits à partir de :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} &= \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta} & \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} &= \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta} \\ \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} &= \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-1}}{\Delta} & \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} &= \frac{v_{i+1,j-\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta} \end{aligned} \quad (103)$$

et l'interpolation de la viscosité pour ces faces est construite à partir de :

$$\begin{aligned} \theta_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} &= \frac{\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}^+ + \phi_{i,j+1}^+ + \phi_{i+1,j+1}^+}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}^+| + |\phi_{i,j+1}^+| + |\phi_{i+1,j+1}^+|} \\ \theta_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} &= \frac{\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}^+ + \phi_{i,j-1}^+ + \phi_{i+1,j-1}^+}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}^+| + |\phi_{i,j-1}^+| + |\phi_{i+1,j-1}^+|} \end{aligned} \quad (104)$$

On reprendra le constat dressé dans [116] en notant que, dans la formulation de Sussman, la contribution visqueuse dans le terme de saut (34) n'apparaît pas explicitement, contrairement à d'autres implémentations disponibles dans la littérature [117]. Néanmoins, sur des calculs déjà réalisés sur le phénomène d'atomisation, et nous le verrons, sur des cas d'impacts de goutte, cette méthode permet l'obtention de bons résultats. On s'en contentera donc pour cette thèse sans développements supplémentaires.

Traitement du saut de pression par la méthode Ghost-Fluid.

A la traversée de l'interface, la pression subit un saut, ici pris en compte à partir de la loi de Laplace (29). Lorsqu'une variable subit un saut, l'évaluation de ses dérivées par discrétisation pose problème. Pour aborder cette question, on utilise la méthode Ghost-fluid [118] qui exploite la représentation d'interface nette. Le principe est d'inclure le saut de la variable directement dans la discrétisation.

Reprenons la discrétisation de la dérivée selon x, intervenant dans l'équation en pression (44) :

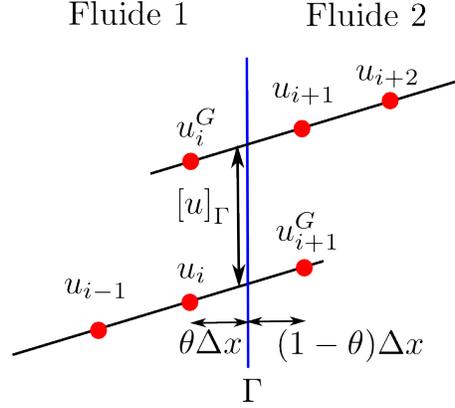


FIGURE 32 – Cas général d’une variable u subissant un saut $[u]_\Gamma$ à la traversée d’une interface Γ , située entre les points i et $i + 1$. Positionnement des points fantômes utilisés pour l’évaluation des dérivées dans la méthode Ghost Fluid.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right)_{i,j} = \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}} \left(\frac{p_{i+1,j}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta^2} \right) - \frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j}} \left(\frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta^2} \right) \quad (105)$$

et considérons le cas où une interface se situe entre la cellule (i, j) et $(i + 1, j)$ comme présenté sur la Figure 32. Dans ce cas, la dérivée en $(i + \frac{1}{2}, j)$ ne peut pas être évaluée directement avec la formulation (105). La méthode Ghost consiste à inclure explicitement le saut de pression en remplaçant dans la discrétisation $p_{i+1,j}^{n+1}$ par une valeur dite “fantôme” $p_{i+1,j}^G$, incluant le saut de pression $[p]_\Gamma$:

$$p_{i+1,j}^G = p_{i+1,j}^{n+1} + [p]_\Gamma \quad (106)$$

Le terme de saut $[p]_\Gamma$ est calculé par la loi de Laplace $[p]_\Gamma = \sigma \kappa_\Lambda$ où σ est le coefficient de tension de surface et κ_Γ la courbure à l’interface. Pour évaluer ce terme, on calcule tout d’abord la champ de courbure à partir du champ de Level Set, au centre des cellules de pression (i, j) . Puis, on interpole cette courbure à l’interface, qui est localisée à l’aide du champ de Level Set. On calcule ainsi :

$$\kappa_\Gamma = \frac{\kappa_{i+1,j} |\phi_{i,j}| + \kappa_{i,j} |\phi_{i+1,j}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}|} \quad (107)$$

Le champ de courbure s’écrit en un point, sous forme semi-discrète :

$$\kappa_{i,j} = \frac{\left(\frac{1}{\|\nabla\phi\|} \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - \left(\frac{1}{\|\nabla\phi\|} \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta} + \frac{\left(\frac{1}{\|\nabla\phi\|} \frac{\partial\phi}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} - \left(\frac{1}{\|\nabla\phi\|} \frac{\partial\phi}{\partial y} \right)_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta} \quad (108)$$

Les dérivées décentrées sont évaluées simplement à partir des points directement voisins. Pour l'exemple :

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta} \quad (109)$$

Malgré l'intuition première, on n'a pas nécessairement $\|\nabla\phi\| = 1$ au cours de la résolution : comme évoqué plus haut, ce peut être le résultat d'une erreur résiduelle de l'algorithme de redistanciation, mais pas uniquement. Si on considère le cas de deux interfaces parallèles, alors $\nabla\phi$ subit un saut à mi-distance : la discrétisation entraîne alors que $\nabla\phi$ calculé peut être très différent de 1. C'est ce qui contribue à rendre le traitement des cas de coalescence ou de dissociation complexes lorsque les deux interfaces sont séparées d'une distance qui approche celle de la maille.

On se propose donc de discrétiser également ce terme pour le calcul de la courbure :

$$|\nabla\phi|_{i+\frac{1}{2},j} = \sqrt{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j}^2 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j}^2} \quad (110)$$

avec

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta} \\ \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{1}{4} \left(\frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}}{\Delta} + \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}{\Delta} + \frac{\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i+1,j}}{\Delta} + \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i+1,j-1}}{\Delta} \right) \end{aligned} \quad (111)$$

On applique enfin des valeurs de seuils pour les calculs de $|\nabla\phi|$ et κ pour des raisons de stabilité :

$$\epsilon_{min,|\nabla\phi|} = 10^{-10} \quad \epsilon_{max,|\kappa|} = \frac{1}{\Delta} \quad (112)$$

2.3.6 Intégration temporelle et résumé général de l'algorithme

Dans les parties précédentes, il n'a pas été fait mention de la discrétisation temporelle employée pour résoudre les équations pour le suivi d'interface ou la méthode de projection.

Le calcul géométrique des flux dans les termes advectifs rend l'utilisation de méthodes de Runge-Kutta [119] (ou tout autre méthode impliquant des combinaisons de flux calculés à différents instants) complexe sans rompre la conservation de la masse et en gardant une interface nette. On se propose donc d'appliquer plutôt la méthode suivante, inspirée des travaux de Vaudor [113]. L'idée est d'appliquer une discrétisation temporelle de type Euler explicite, sur un pas de temps $\frac{\Delta t}{2}$ afin d'obtenir une estimation du champ de vitesse $\mathbf{U}^{n+\frac{1}{2}}$. Ce champ de vitesse intermédiaire, appelée vitesse convective, est utilisé pour les calculs de flux convectifs calculés géométriquement : cette vitesse est

utilisée pour bâtir le volume qui va traverser une face pendant l'intervalle de temps donné; la quantité advectée reste exprimée à l'instant n . Le reste des flux sont calculés à partir des variables à l'instant n .

On se propose donc de résumer dans l'encadré suivant les différentes étapes du code de calcul, permettant l'obtention des variables $\phi^{n+1}, C^{n+1}, \mathbf{U}^{n+1}, P^{n+1}$ à partir des variables $\phi^n, C^n, \mathbf{U}^n$.

Première passe :

$$(\phi^{n+\frac{1}{2},*}, C^{n+\frac{1}{2}}) = (\phi^n, C^n) + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{L}_{Interf.}(\phi^n, C^n, \mathbf{U}^n)$$

$$\phi^{n+\frac{1}{2}} = \mathcal{S}_{Redist}(\phi^{n+\frac{1}{2},*})$$

$$\mathbf{U}_{conv}^* = \mathbf{U}^n + \frac{\Delta t}{2} (\mathcal{L}_{conv}(\phi^n, C^n, \mathbf{U}^n) + \mathcal{L}_{visq}(\phi^n, C^n, \mathbf{U}^n) + \mathcal{F}_{grav})$$

$$p^{n+\frac{1}{2}} = \mathcal{S}_{Poisson}(\mathbf{U}_{conv}^*, \phi^{n+\frac{1}{2}}, C^{n+\frac{1}{2}})$$

$$\mathbf{U}_{conv}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{U}_{conv}^* - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho^{n+\frac{1}{2}}(\phi^{n+\frac{1}{2}}, C^{n+\frac{1}{2}})} \nabla p^{n+\frac{1}{2}}$$

Seconde passe :

$$(\phi^{n+1,*}, C^{n+1}) = (\phi^n, C^n) + \Delta t \left(\mathcal{L}_{Interf.}(\phi^n, C^n, \mathbf{U}_{conv}^{n+\frac{1}{2}}) \right)$$

$$\phi^{n+1} = \mathcal{S}_{Redist}(\phi^{n+1,*})$$

$$\mathbf{U}^* = \mathbf{U}^n + \Delta t \left(\mathcal{L}_{conv}(\phi^n, C^n, \mathbf{U}_{conv}^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{U}^n) + \mathcal{L}_{visq}(\phi^n, C^n, \mathbf{U}^n) + \mathcal{F}_{grav} \right)$$

$$p^{n+1} = \mathcal{S}_{Poisson}(\mathbf{U}^*, \phi^{n+1}, C^{n+1})$$

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^* - \frac{\Delta t}{\rho^{n+1}(\phi^{n+1}, C^{n+1})} \nabla p^{n+1}$$

\mathcal{L}_{Interf} représente l'étape d'advection de l'interface réalisée par la méthode CLSVOF - équations (73) à (82).

\mathcal{S}_{Redist} représente l'opération de réinitialisation - équations (83) à (86).

\mathcal{L}_{Conv} représente le terme d'advection de la quantité de mouvement par la méthode CMOM - équations (87) à (96). Lors de la deuxième passe, $\mathbf{U}_{conv}^{n+\frac{1}{2}}$ est utilisée pour construire le volume traversant l'interface, tandis que la vitesse attribuée à ce volume est construite à partir de \mathbf{U}^n .

\mathcal{L}_{visq} représente les termes visqueux, équations (97) à (104).

$\mathcal{S}_{Poisson}$ représente la résolution de l'équation de Poisson (41). Le terme de saut est intégré dans la construction de la matrice de pression par la méthode Ghost-Fluid - équations (105) à (112) - et la résolution est effectuée par Gradient Conjugué préconditionné par une méthode multi-grille.

Choix du pas de temps pour la résolution.

La formulation explicite présentée dans l'étape de prédiction implique une limite pour le pas de temps pour garantir la stabilité. On construit pour chaque terme un critère de stabilité associé, en reprenant les expressions données dans [117].

$$\begin{aligned} C_{conv} &= \frac{\max(\|u\|_\infty, \|v\|_\infty)}{\Delta} \\ C_{visq} &= \max\left(\frac{\mu_\ell}{\rho_\ell}, \frac{\mu_g}{\rho_g}\right) \frac{4}{\Delta} \\ C_{grav} &= \sqrt{\frac{1}{\Delta} \max(|g_x|, |g_y|)} \\ C_{capil} &= \frac{\sigma \|\kappa\|_\infty}{\rho_g \Delta^2} \end{aligned} \quad (113)$$

avec la condition finale résultante :

$$\Delta t^n \left(C_{conv} + C_{visq} + \sqrt{(C_{conv} + C_{visq})^2 + 4(C_{grav} + C_{capil})} \right) \leq 2CFL \quad (114)$$

où le paramètre CFL est inférieur à 0.5. On utilise couramment une valeur légèrement inférieure (en général entre 0.3 et 0.4) pour garantir au mieux la stabilité.

2.4 Conclusion

Dans cette partie, nous avons décrit le modèle physique retenu : on se base sur les équations de Navier Stokes incompressibles, diphasiques et sans changement de phase. La méthode de projection est employée pour résoudre ces équations et on a détaillé la formulation et la discrétisation des différents termes. Les encadrés présents dans ce chapitre pourront notamment servir de repère au lecteur désireux d'avoir une vision globale du code.

Un effort particulier a été conduit dans le traitement des termes advectifs : les flux de masse et de quantité de mouvement sont calculés géométriquement à partir d'une reconstruction de l'interface, contribuant à la bonne robustesse du code. C'est ce qui justifie en particulier le choix de ce code.

On souhaite à présent évaluer la précision du code DYJEAT en simulant une série de cas tests élémentaires, validation nécessaire pour pouvoir prétendre à la simulation d'impacts de gouttes à haute vitesse.

3 Etude du comportement du code et développements numériques en préparation à la simulation d'impact.

Contenu du chapitre

3.1 Etude de la génération de courants parasites lors de la simulation 2D d'une goutte statique.	73
3.1.1 Moyens testés pour la réduction des courants parasites.	74
3.1.2 Identification de l'interpolation dans la méthode Ghost comme source prépondérante de courants parasites.	75
3.2 Développements numériques dans le contexte du calcul haute performance.	79
3.2.1 Optimisation des performances par restriction du domaine d'application du suivi d'interface.	79
3.2.2 Etude de scalabilité sur un cas de transport de goutte.	80
3.2.3 Développement de méthodes de post-traitement pour l'extraction de données des simulations DNS de grande taille.	84
3.3 Bilan du chapitre	87

Dans ce chapitre, nous nous intéresserons aux études et aux développements numériques réalisés sur le code DYJEAT.

Dans un premier temps, étudions le comportement du code sur un cas de goutte statique. On trace l'origine des courants parasites et on propose une réduction significative de leur amplitude. Nous présentons ensuite la contribution réalisée au cours de cette thèse pour porter davantage le code dans le Grand Calcul. En particulier, une réduction significative des temps de calcul sera proposée par la restriction du domaine de résolution du transport de l'interface. Une étude de scalabilité sera ensuite proposée sur un centre de calcul national. Enfin, on présentera le développement de plusieurs méthodologies pour faire face aux problématiques du post-traitement des calculs de grande taille (sur des domaines de plus d'un milliard de cellules).

3.1 Etude de la génération de courants parasites lors de la simulation 2D d'une goutte statique.

Au cours de son développement, le code DYJEAT est régulièrement soumis à une série de cas de validation. Un cas qui a particulièrement attiré notre attention est celui de la simulation d'une goutte initiée sans vitesse, dans un air au repos et sans gravité. Le comportement attendu sur ce cas est un champ parfaitement au repos. Du fait de la discrétisation et des erreurs numériques, de faibles vitesses apparaissent à l'interface appelées *courants parasites*. Avec

l'introduction des méthodes couplées Level-Set/VoF, et d'avantage avec le traitement conservatif du transport de la quantité de mouvement, il s'est avéré que ces courants parasites pouvaient atteindre sur les temps longs une amplitude suffisante pour provoquer le déplacement de la goutte et sa destabilisation. Des courants de forte amplitude peuvent parasiter les simulations d'impacts à faible vitesse, notamment sur l'étude des effets capillaires en paroi qui sera menée par la suite. La génération de courants parasites importants a été constaté sur le cas de goutte statique en 2D autant qu'en 3D. Aussi, on s'intéressera ici à une étude 2D.

Les paramètres de la simulation sont ceux proposés par Frédéric COUDERC dans sa thèse [88] et rappelés dans le tableau ci-dessous :

$$\begin{aligned} L &= 4 \text{ cm} & R &= 1 \text{ cm} \\ \rho_\ell &= 1000 \text{ kg.m}^{-3} & \mu_\ell &= 10^{-3} \text{ Pa.s} & \sigma &= 0.1 \text{ N.m}^{-1} \\ \rho_g &= 1 \text{ kg.m}^{-3} & \mu_g &= 10^{-5} \text{ Pa.s} & La &= 2.0 \times 10^6 \end{aligned} \quad (115)$$

où L correspond au côté du carré que constitue le domaine de calcul et R le rayon de la goutte. Le nombre de Laplace $La = \frac{2R\sigma\rho_\ell}{\mu_\ell^2}$ permet de comparer les forces de tension de surface aux forces inertielles.

3.1.1 Moyens testés pour la réduction des courants parasites.

Au cours d'une étude menée au cours d'un stage avant le début de la thèse [120], l'étape de redistance avait été ciblée comme source prioritaire de courants parasite. En effet, l'étape de redistance, dont on rappelle l'équation ci-dessous modifie le champ initial et est donc source d'erreur. Dans cette thèse, nous avons poursuivi ce travail en suivant la démarche proposée dans le stage. Plusieurs essais ont été réalisés pour réduire l'amplitude des courants parasites et il s'agira ici d'en dresser brièvement le bilan.

$$\frac{\partial\psi}{\partial\tau} = \text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t))(1 - \|\nabla\psi\|) \quad (116)$$

Si la modification du nombre d'itérations de redistance influence l'erreur créée sur le champ de ϕ , aucune valeur du nombre d'itérations n'a permis d'assurer la stabilité de la goutte. On se propose donc de modifier l'étape de redistance dans ce but.

En premier lieu, on tente désactiver la redistance sur les cellules proches de l'interface (sous critère $|\phi| < 2\Delta$). Si cette modification réduit l'amplitude de l'erreur sur les cellules de deux ordres, elle ne permet pas non plus d'obtenir une stabilité de la goutte. Au contraire, le calcul peut brutalement diverger en cours de simulation, comme pour le cas où aucun algorithme de redistance n'est appliqué. Pour réduire l'erreur tout en assurant la stabilité du calcul, l'algorithme de redistance est reformulé en intégrant la correction proposée par Hartmann et al. [121]. Le principe est d'ajouter un terme source à l'équation Eikonale s'appliquant uniquement aux cellules proche de l'interface. Ce terme source mesure la différence entre la solution donnée par l'algorithme et le champ initial et tend à ramener la Level Set vers cette valeur initiale. De nouveau, si

une amélioration significative est obtenue sur la norme d'erreur mesurée sur le champ de ϕ , ceci ne suffit pas à stabiliser la goutte.

Plusieurs tentatives de filtrage ont également été réalisées en suivant la démarche qui avait été proposée dans le code JADIM de l'IMFT [122] : un filtre idéal, un filtre Gaussien et le filtre présenté dans JADIM ont été appliqués, soit sur le champ de Level Set résultant de la redistance, soit sur le champ de courbure. Seuls les filtres les plus importants appliqués permettent de stabiliser la goutte. En Figure 33, on montre l'amplitude des courants parasites résultant de l'application du filtre proposé dans JADIM. Ce filtre propose d'appliquer au champ à filtrer le produit de convolution avec la matrice de convolution suivante K définie comme :

$$K = \begin{pmatrix} 0 & 1/16 & 0 \\ 1/16 & 3/4 & 1/16 \\ 0 & 1/16 & 0 \end{pmatrix} \quad (117)$$

Le filtre peut être appliqué plusieurs fois pour intensifier son effet. Dans notre cas, appliquer le filtre 8 fois permet de stabiliser le calcul, au prix d'une erreur importante sur le champ de courbure. Parce que rien ne garantit la stabilité du calcul sur des temps plus longs, parce qu'un tel filtrage induit une erreur importante sur le champ considéré et parce que cette solution est très empirique, on ne s'en contente pas ici. La partie suivante présente la tentative la plus fructueuse qui a été réalisée pour la réduction des courants parasites.

3.1.2 Identification de l'interpolation dans la méthode Ghost comme source prépondérante de courants parasites.

Dans le bilan précédent, nous avons tenté de pallier la génération de courants parasites sans réellement en tracer l'origine, et ce au cours de tentatives aussi infructueuses que chronophages. Aussi, nous reprenons ici la démarche en tentant cette fois de questionner l'origine des courants dans le cadre d'un calcul Level Set pur.

Lors de la première itération du solveur, l'interface ne se déplace que sous l'effet de la redistance car le champ de vitesse est nul. Par la suite, on calcule un champ de courbure qui diffère du champ analytique, du fait de l'erreur sur le champ de ϕ d'une part, et des erreurs de discrétisation dans le calcul de la courbure d'autre part. Ici, le champ de courbure théorique est en deux dimensions $\kappa_{anal}(\mathbf{x}) = \frac{1}{r(\mathbf{x})}$ avec $r = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_g\|$ où \mathbf{x}_g est la position du centre de la goutte. Pour mesurer l'effet de l'erreur dans le calcul de courbure sur les courants parasites, on fige l'interface à sa position initiale, en désactivant la redistance et le transport de ϕ . La Figure 34 montre de façon très surprenante une amplitude des courants similaire entre le calcul du champ de courbure et l'utilisation d'un champ de courbure analytique. Autrement dit, un champ de courbure idéal ne suffit pas à supprimer la génération de courants parasites, même dans le cas d'une interface figée.

On s'intéresse donc à l'utilisation qui est faite du champ de courbure. La courbure intervient dans le calcul du saut de pression : celui-ci est calculé au

Filtrage de la courbure

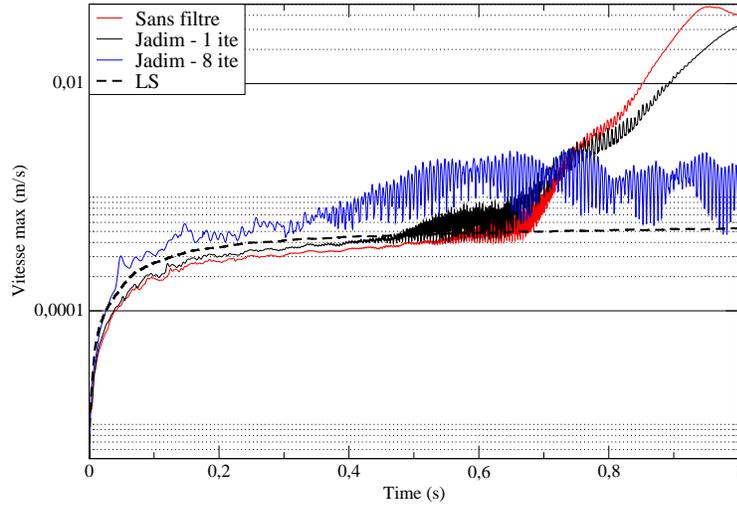


FIGURE 33 – Amplitude maximum des courants parasites obtenue sur des calculs CLSVOF pour un maillage 64^2 . Le filtre JADIM est appliqué au champ de courbure. La courbe noire représente les résultat avec une application du filtre, tandis que la courbe en bleu propose 8 applications successives du filtre à chaque itération du solver. La simulation Level Set est donnée en pointillés en guise de référence.

centre des cellules de pression, puis interpolé dans le cadre de la méthode Ghost comme décrit au Chapitre 2. Pour évaluer l'effet de l'interpolation, on fixe cette fois-ci le champ de courbure à une valeur constante $\kappa_i = 1/R$ de sorte que la valeur interpolée est la valeur exacte. On compare ce calcul avec celui réalisé avec un champ de courbure analytique $\kappa_{anal}(\mathbf{x}) = \frac{1}{r(\mathbf{x})}$. La vitesse maximale obtenue à la suite de la première itération est édifiante (Table 5) : en utilisant une courbure uniforme, l'amplitude des courants générés est à la précision machine. On met ici en évidence que c'est l'interpolation de la valeur de la courbure (ou de façon équivalente, du saut de pression) qui conduit de façon prédominante à la génération de courants parasites. Sous cet angle, l'effet du filtrage vu précédemment est éclairé : en effet, un filtrage important tend à uniformiser le champ de courbure et ainsi à réduire l'effet de l'interpolation.

Rappelons à ce stade que, dans le cadre de la méthode Ghost, l'interpolation du saut de pression est réalisée, dans le cas d'une interface située entre les points

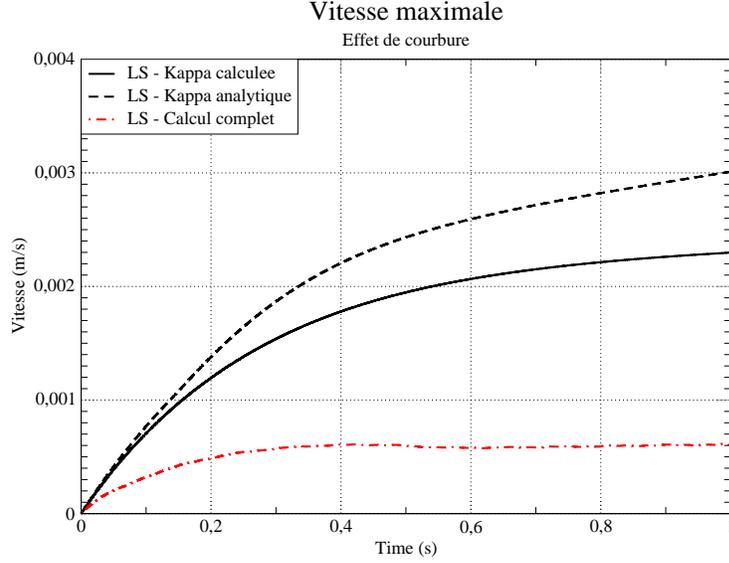


FIGURE 34 – Effet du calcul de courbure sur l’amplitude maximum des courants parasites. Les courbes en noir résultent de calculs sans advection ni redistance.

Courbure utilisée	$\kappa = f(\phi)$	$\kappa_{anal} = 1/r(\mathbf{x})$	$\kappa_i = 1/R$
$V_{max}(m.s^{-1})$	0.171×10^{-6}	0.174×10^{-6}	0.698×10^{-17}

TABLE 5 – Amplitude maximale des courants parasites obtenus après une itération.

i et i+1, par la formulation :

$$[P]_{\Gamma} = \frac{|\phi_i|[P]_{i+1} + |\phi_{i+1}||[P]_i}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|} \quad (118)$$

Autrement dit, on fait l’hypothèse que le saut de pression évolue linéairement avec la distance à l’interface. Or, la courbure est définie comme l’inverse du rayon de courbure (en 2D). Par définition, c’est le rayon de courbure qui évolue linéairement à la distance à l’interface. Ainsi, interpoler la courbure linéairement revient à faire l’approximation linéaire d’une fonction inverse. Aussi, pour évaluer la pertinence de cette remarque, on réalise un calcul complet de goutte statique en remplaçant l’interpolation précédente par l’interpolation linéaire du rayon de courbure :

$$[P]_{\Gamma} = \left(\frac{|\phi_i|[P]_{i+1}^{-1} + |\phi_{i+1}|[P]_i^{-1}}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|} \right)^{-1} \quad (119)$$

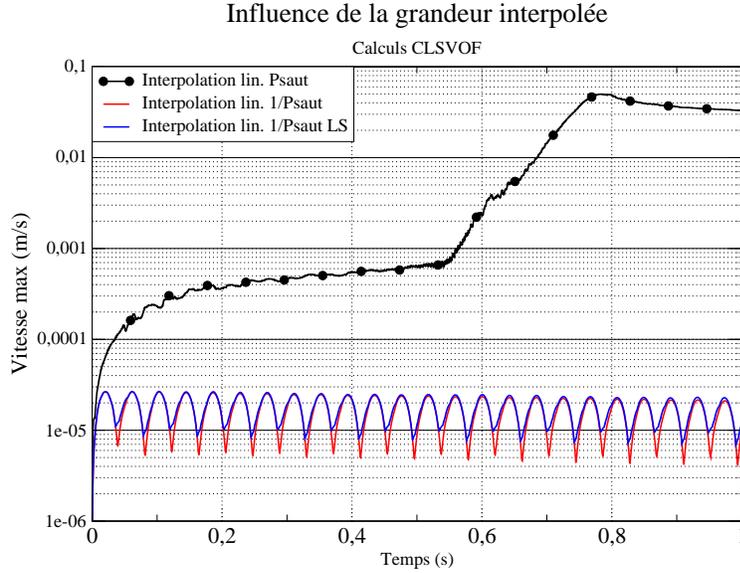


FIGURE 35 – Effet de l’interpolation sur l’amplitude des courants parasites obtenus. En noir : calcul CLSVOF avec interpolation linéaire de la courbure. En rouge : Calcul CLSVOF avec interpolation du rayon de courbure. En Bleu : Calcul Level Set avec interpolation du rayon de courbure.

Les résultats de ce calcul sont proposés en Figure 35. L’amplitude des courants parasites est identique dans le cas CLSVOF et Level Set, et 50 fois inférieure à celle obtenue initialement avec une simulation Level Set en Figure 33. De plus, l’amplitude est stable dans le temps ce qui est un résultat inédit avec le code DYJEAT.

Nous avons ici montré le rôle prépondérant de l’interpolation dans la génération de courants parasites avec la méthode Ghost-Fluid et montré que l’interpolation linéaire du rayon de courbure faisait plus de sens que l’interpolation linéaire de la courbure elle-même. En revanche, il faut noter que la formulation (119) n’est en général pas utilisable telle quelle. En effet dans le cas d’une interface plane, le rayon de courbure est infini et l’interpolation échoue. Les premiers essais consistant à basculer de l’interpolation (118) à l’interpolation (119) selon la valeur de la courbure ont montré une mauvaise stabilité. Il s’agirait donc en perspectives de tester l’effet d’autres interpolations sur plusieurs cas tests. Comme les configurations visées sont des

impacts à grande vitesse, on suppose que l’amplitude des courants parasites ne perturbera pas le résultat de ces simulations et nous choisissons donc, sous contrainte de temps, de ne pas pousser plus loin cette étude.

Après avoir analysé finement le comportement du code sur un cas de goutte statique, plusieurs développements sont proposés dans le cadre du calcul Haute Performance pour préparer les simulations d’impacts de gouttes qui seront réalisées dans les chapitres suivants.

3.2 Développements numériques dans le contexte du calcul haute performance.

Comme nous le verrons dans les chapitres suivants, les simulations d’impacts de gouttes nécessitent des maillages raffinés si on souhaite capturer la génération de gouttes secondaires. Dans le cadre d’impacts à haute vitesse, ceci nous amènera à des simulations sur des domaines de plus d’un milliard de points, mobilisant plusieurs milliers de cœurs de la machine, avec des coûts associés pouvant être de l’ordre du million d’heures CPU par calcul. Dans ce contexte, un usage optimisé de la ressource et l’usage de pratiques adaptées est de première importance. Nous proposons dans cette section une optimisation des performances, une analyse de scalabilité sur un grand nombre de cœurs et le développement de méthodologies de post-traitement adaptées au Grand Calcul.

3.2.1 Optimisation des performances par restriction du domaine d’application du suivi d’interface.

Au cours de cette thèse, plusieurs optimisations en terme de performances ont été réalisées. Un travail d’entretien du code a été mené par l’ensemble de l’équipe pour améliorer la lisibilité de celui-ci et supprimer l’utilisation de tableaux de variables inutiles (présents dans le code par effet d’histoire ou pour d’autres raisons). Toutes ces optimisations mineures ont abouti à des gains en performances. A titre d’exemple, une simple réorganisation du programme principal et un découpage de certains fichiers sources ont permis un gain en performance de l’ordre de 4%. Au delà d’une lisibilité pour le développeur, des sources structurées permettent également au compilateur de mieux optimiser certaines portions de code.

Ici, on s’intéresse principalement à une optimisation centrée sur le suivi d’interface. Rappelons que l’interface est décrite à partir des variables Level Set (ϕ) et Volume of Fluid (VoF). Ces variables sont nécessaires pour effectuer le transport d’une part, et pour appliquer les conditions de saut d’autre part. Leur intérêt est donc localisé à l’interface, ou plus exactement dans une bande de cellules autour de celle-ci (déterminée notamment par le *stencil* de la discrétisation). L’optimisation proposée a donc consisté à restreindre la résolution des équations de transport et de redistanciation à une bande d’épaisseur $\gamma = n_\gamma \Delta$ autour de l’interface. Pour cela, on s’appuie sur la

méthode proposée par Xu et al. [123]. On définit ainsi si un tube de résolution \mathcal{T} par :

$$\mathcal{T} = \left\{ (x_i, y_j, z_k) / \min_{ii, jj, kk = -1, 0, 1} |\phi(i + ii, j + jj, k + kk)| < \gamma \right\} \quad (120)$$

Dans le cas où la cellule considérée n'appartient pas à \mathcal{T} , la variable ϕ est seuillée à $\pm\gamma$ et le VoF à 0 ou 1 selon la phase considérée. La résolution des équations de transport comme l'étape de redistance est limitée à ce tube d'épaisseur γ . Si aucune étude détaillée sur la limite d'épaisseur possible n'a été menée, une épaisseur de 8Δ de part et d'autre de l'interface a été utilisée dans la plupart des simulations.

Le gain en performance obtenu dépend fortement de la répartition de l'interface dans le domaine. Si dans l'un des sous-domaines affecté à une tâche MPI, des cellules d'interfaces sont étendues de sorte que l'ensemble du sous-domaine appartient au tube de résolution, alors les gains escomptés sont nuls sur le pas de temps considéré. Aucun surcoût n'a été mesuré dû à l'ajout de ce masquage. Sur des simulations de transport de goutte, un gain d'environ 10% a été mesuré. Rappelons que la partie la plus coûteuse du code est le solveur de pression et que celle-ci n'est pas affectée par l'optimisation proposée ici.

3.2.2 Etude de scalabilité sur un cas de transport de goutte.

Dans le cadre de notre étude, la réalisation d'une simulation sur plus d'un milliard de points peut nécessiter plusieurs milliers de cœurs de calculs. En effet, le code DYJEAT repose sur le paradigme MPI dans lequel chaque processus est affecté à la résolution d'un sous-domaine. Ce sous-domaine prend la forme d'un parallélépipède rectangle dont chaque arête est une rangée de 2^k cellules. En pratique, on choisit plutôt un sous-domaine cubique de $[2^n]^3$ cellules, et ce afin d'optimiser les performances de l'algorithme multi-grilles du solveur de pression. Chaque processus MPI est lié à un cœur physique de la machine sur laquelle le code s'exécute. Réciproquement chaque cœur physique de la machine ne se voit affecté qu'un unique processus (pas d'utilisation d'*hyperthreading*). Aussi on parlera indifféremment de processus MPI ou de cœurs de calcul pour le reste du manuscrit.

Dans la plupart des simulations 3D, on choisit une charge de 64^3 cellules affectée à chaque processus. Une charge supérieure (128^3) implique une empreinte mémoire importante ($\sim 18 Mo$ par tableau de scalaires) et un temps de restitution jugé trop long. A l'inverse, une charge plus faible (32^3) permet un retour rapide mais implique l'utilisation d'un nombre de cœurs très important, se heurtant aux limites de configuration proposées par les calculateurs. De plus, la charge mémoire et les communications liées aux cellules fantômes (qui représentent alors 40% du nombre total de cellules) deviennent importants par rapport aux coûts liés au domaine effectivement résolu.

L'analyse de scalabilité permet justement d'évaluer ce coût lié aux communications. Deux analyses peuvent être fournies. Une analyse de *scalabilité forte* consiste à réaliser une simulation séquentielle, puis à réaliser une simulation sur le même domaine en répartissant la charge sur un nombre croissant de cœurs. À l'inverse, le *scalabilité faible* [124] consiste à agrandir le domaine de résolution avec le nombre de cœurs utilisés, de sorte à conserver une charge par cœur constante. Le *scalabilité forte* permet plutôt de vérifier si les performances du code suivent la loi d'Amdahl [125] et aide au dimensionnement de la charge à affecter à chaque processus. La *scalabilité faible* évalue d'avantage l'efficacité de la parallélisation dans un contexte de calcul haute performance, avec l'utilisation d'un grand nombre de cœurs et un effet possible de l'architecture du calculateur.

L'étude de *scalabilité forte* est ici écartée pour deux raisons. D'une part, on dispose déjà de l'expérience suffisante pour dimensionner la charge de calcul par cœur, le choix étant par ailleurs restreint du fait de la forme imposée des sous-domaines. D'autre part, une analyse de scalabilité forte nécessite, si on veut la porter sur plusieurs milliers de cœurs et avec la contrainte de la forme des sous-domaines, la réalisation d'une simulation initiale d'un très grand domaine sur un unique cœur. Ceci implique l'utilisation d'un nœud à large mémoire pour supporter cette charge. Or nous menons cette étude sur le calculateur Jean-Zay de l'IDRIS, pour lequel les nœuds à large mémoire sont équipés d'un processeur différent de celui des autres nœuds de calcul. Ce constat exclut donc l'étude de scalabilité forte car le changement de processeur apporterait un biais dans les performances.

On mène ici une étude de scalabilité faible, l'idée étant de savoir si les performances constatées sur quelques cœurs restent stables lors du passage à plusieurs milliers de cœurs. Pour cela, on simule sur un cœur le cas d'un transport d'une goutte dans un domaine périodique. L'extension du domaine est alors réalisée en dupliquant le domaine pour chaque processus MPI comme illustré en Figure 36. Ce cas permet par construction d'équilibrer parfaitement la charge de calcul entre les différentes unités de calcul. Néanmoins, parce qu'on répartit les gouttes sur les différentes directions, le nombre de voisins pour chaque sous-domaine, et donc la quantité des communications associées, dépend du nombre de goutte total. Le résultat de l'étude de scalabilité sur ce cas jusqu'à 11520 cœurs est présenté en Figure 37.

Le résultat de cette étude montre une chute rapide de scalabilité jusqu'à 20 cœurs puis une baisse plus progressive des performances. Au plateau central, la performance est de l'ordre de 50% ce qui indique que le temps mis pour le calcul est deux fois plus long que pour un calcul sur un unique cœur. Pour comprendre cette chute, il est nécessaire de s'intéresser brièvement à l'architecture matérielle du calculateur Jean-Zay.

Le calculateur Jean-Zay est équipé pour sa partition CPU de 1528 nœuds de calcul avec 40 cœurs physiques et 192 Go de mémoire vive par nœud.¹. En

1. Le calculateur est également équipé de 261 nœuds équipés de 40 cœurs et de 4 cartes

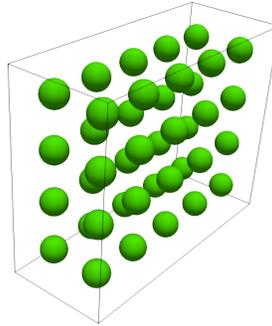


FIGURE 36 – Etude de *scalabilité faible* - Configuration initiale pour un calcul sur 40 cœurs : transport de 40 gouttes dans un domaine périodique.

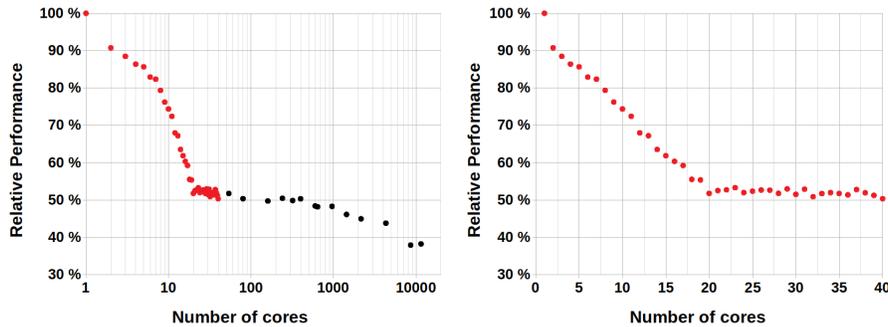


FIGURE 37 – Etude de *scalabilité faible* – Performance relative définie comme t_{seq}/t_n où t_{seq} est le temps d’exécution sur un cœur et t_n le temps sur n cœurs. À gauche, étude jusqu’à 11520 cœurs. Les points rouges représentent les calculs menés sur un unique nœud de calcul. À droite, zoom sur la plage 1-40 cœurs.

réalité, les 40 cœurs ne sont pas situés sur un unique processeur et le profil d’un nœud de calcul (Fig. 38) diffère sensiblement d’une configuration que l’on peut trouver dans une station de travail individuelle.

Dans le calculateur Jean-zay, les 40 cœurs d’un unique nœud sont fournis par deux processeurs Intel Cascade Lake 6248 (20 cœurs à 2,5 GHz). On comprend alors que les 20 premières tâches MPI se positionnent en fait sur un seul des deux processeurs (ou *socket*) présent sur le nœud. Entre 20 et 40 cœurs, les performances sont stables malgré une augmentation du nombre de cœurs. Ce point montre bien qu’il ne s’agit pas ici d’un défaut de parallélisation mais

graphiques NVIDIA V100, de 5 nœuds frontaux de connexion et de 5 nœuds de visualisation. Ajoutons enfin quatre nœuds à large mémoire équipés de processeurs Intel Skylake 3,2 GHz, 12 cœurs avec 3 To de mémoire par nœud. Voir configuration complète sur <http://www.idris.fr/jean-zay/jean-zay-presentation.html>.

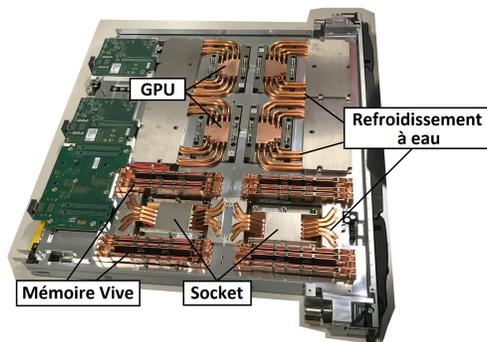


FIGURE 38 – Lame BULL-Sequana X1000 équipant le supercalculateur OLYMPE au mésocentre de Midi-Pyrénées CALMIP. Ici, la lame n'accueille qu'un seul nœud de calcul, composé de deux processeurs Skylake et de quatre cartes graphiques Volta V100 – refroidissement à eau.

bien d'une question liée à l'augmentation de la charge du processeur : entre 20 et 40 cœurs, tous les cœurs du premier processeur sont pleins ce qui explique l'effet plateau. Notons que sur la plage $[0;20]$ cœurs, la différence du nombre de communications liée à la répartition anisotrope des gouttes ne semblent pas affecter les performances, ce qui appuie l'hypothèse de la charge progressive du processeur comme responsable principal de cette baisse.

Lorsqu'on augmente le nombre de tâches MPI sur un même processeur, on augmente autant la quantité d'opérations de calcul à réaliser que de données à charger en mémoire. Or, si les opérations sont effectuées sur des unités de calculs différents (les cœurs physiques), les canaux mémoire, eux, sont de taille fixe. Plus précisément, les cœurs partagent l'accès à la mémoire vive (hors du processeur) et aux plus hauts niveaux de cache (en général, le cache L3 au moins). La taille du cache L3 sur le processeur Intel Cascade Lake 6248 est de $27,5\text{Mo}^2$. Sur le cas considéré, cette taille mémoire correspond à 10 tableaux de réels en double précision. Or, l'*intensité arithmétique* dans les codes de mécanique des fluides comme DYJEAT est relativement faible, *i.e.* on réalise généralement peu d'opérations avec une donnée chargée en mémoire. Ceci illustre la caractéristique du code d'être limité par la mémoire (*memory bound*).

Dans ce contexte, on comprend aisément la chute des performances constatée sur les 20 premiers cœurs, et on aurait même pu s'attendre à une chute de performances bien plus importante si les canaux mémoires étaient complètement saturés. Dans l'objectif de mesurer le coût induit par les communications, la comparaison au temps mis par un unique cœur de calcul fait peu de sens. Aussi, dans la Figure 39, on trace de nouveau la mesure de performance en rapportant cette-fois le temps d'exécution au temps d'exécution sur un *socket* (20 cœurs). Avec cette mesure, on note cette fois une scalabilité quasi-parfaite jusqu'à 400

2. Voir : <https://ark.intel.com>

cœurs et une diminution très progressive par la suite. Notons que sur le plus grand domaine simulé, la performance mesurée est de 74% malgré l'utilisation de 11520 cœurs de calculs soit près de 20% du centre national Jean-Zay, ce que l'on considère comme un excellent résultat.

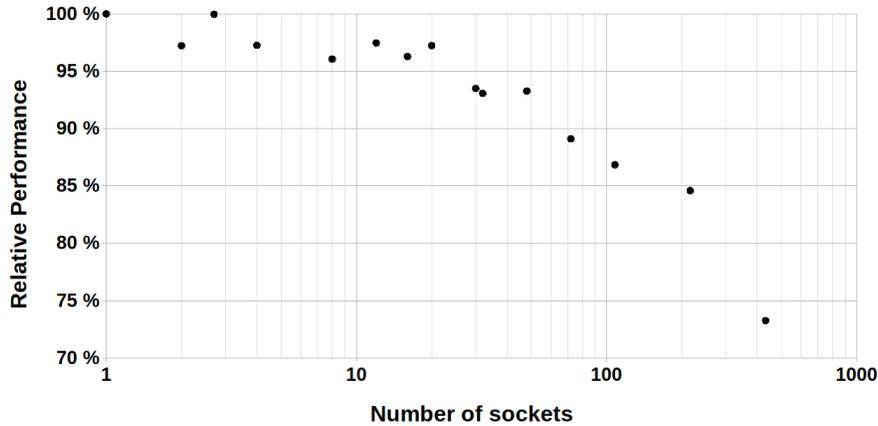


FIGURE 39 – Etude de *scalabilité faible* – Performance relative définie comme t_{20}/t_n où t_{20} est le temps d’exécution sur un processeur (20 cœurs et t_n le temps sur n cœurs. Etude menée jusqu’à 288 nœuds, soit 576 processeurs ou 11520 cœurs.

3.2.3 Développement de méthodes de post-traitement pour l’extraction de données des simulations DNS de grande taille.

L’étude de simulations de grande taille ne questionne pas uniquement les performances, elle nécessite d’adapter l’ensemble des pratiques autour du calcul. En effet, le stockage d’un seul champ scalaire (réel simple précision) sur une simulation d’un milliard de points nécessite environ 4 Go. Ainsi pour le stockage des variables primaires (ϕ , VOF , \mathbf{V} , P), 25 Go par itération stockée sont nécessaires. En stockant un point toutes les 20h (temps de réservation maximum de ressource typique sur un supercalculateur) au cours d’une simulation d’un peu plus d’un mois (temps caractéristiques des simulations réalisées au Chapitre 5), les résultats primaires d’une unique simulation atteignent déjà 1 To, hors données annexes (fichiers de reprises, ...). Une campagne de calculs peut comporter plusieurs dizaines de calculs.

Ce volume important de données pose plusieurs problèmes. Tout d’abord, un problème de stockage : puisqu’il n’est pas question au laboratoire d’héberger une telle quantité de données, l’hébergement ne peut-être fait que proche des moyens de calculs, en utilisant les espaces de stockages fournis par les centres de calcul, pour lesquels le stockage et l’archivage des données est une problématique

en soi. Nous n’aborderons à ce titre que la question de la lecture et de l’écriture des fichiers par le code DYJEAT : le format binaire Ensight utilisé s’est révélé suffisant pour nos pratiques (malgré un temps de lecture équivalent à plusieurs itérations de calculs) et les routines d’entrées/sorties n’ont nécessité pour les grands calculs que des adaptations mineures. Notons que cette problématique de temps d’accès aux fichiers est fortement d’actualité puisque le centre de calcul national de l’IDRIS s’est équipé pour sa nouvelle machine d’un système de stockage sur disque SSD permettant de réduire fortement ces coûts.

Puisque les données sont stockées aux centres de calcul, leur post-traitement pose un problème en soi. En effet, la solution la plus commune pour des simulations de tailles plus petites consiste à rapatrier temporairement les données pour les post-traiter en local. Or, pour transférer les résultats d’une simulation ($\sim 1\ To$) à travers un réseau fibre ($\sim 100\ Mo.s^{-1}$ en condition typique d’utilisation constatée), 3h sont nécessaires pour faire le transfert. Ajoutons à cela le besoin en mémoire vive important et le temps de post-traitement (logiciels souvent séquentiels dans les pratiques par défaut, nous y revenons par la suite), ces étapes annexes au calcul peuvent devenir difficiles techniquement, chronophages voire décourageantes pour l’utilisateur. Ces difficultés engendrent un manque de flexibilité dans la recherche et sont très contre-productives pour l’exploitation des résultats : paradoxalement, sans les pratiques adaptées, il est difficile d’extraire des données depuis les simulations DNS résolues, ce qui est pourtant leur but premier !

Un palliatif consiste à utiliser les solutions de visualisation déportée fournies, quand c’est le cas, par les centres de calculs. Le principe est que les instructions sont exécutées sur une machine au centre de calcul, et seul le flux graphique (affichage à l’écran) est renvoyé à l’utilisateur. L’intérêt est de pouvoir réduire les temps de transfert en exploitant la proximité des données, et de disposer de machines à large mémoire. Néanmoins, les temps de chargement en mémoire et la fluidité réduite de la connexion graphique restreignent l’accessibilité de ce type de solution. De plus, quand l’opération demandée va au-delà des opérations élémentaires (tracé d’iso-contour, coupe, ...), les solutions proposées par l’interface graphique des logiciels de visualisation peuvent devenir inefficaces sur les maillages considérées.

Le choix qui a été fait au cours de cette thèse, après l’exploration de ce type de solutions, a été de revoir plus en profondeur les pratiques de post-traitement. Pour cela, on a tout d’abord exploré les fonctionnalités avancées du logiciel PARAVIEW³ : les post-traitements ont en effet été réalisées en réalisant une série de scripts Python qui peuvent ensuite être exécutés par PARAVIEW pour charger les données, les traiter et générer une image (par exemple) sans aucun retour graphique. Après l’élaboration de ces scripts en local sur des cas simplifiées (positionnement de la caméra, ...), on réalise le post-traitement directement au centre de calcul en réservant un ou plusieurs nœuds de calcul (exécution en parallèle). Il ne reste ensuite qu’à

3. Logiciel *open-source* de visualisation : voir <https://www.paraview.org/>

rapatrier les images ou les données traitées. L'exploration de ces pratiques a fait l'objet d'un projet réalisé par deux étudiantes de l'INSA Toulouse qui ont fortement contribué à ces travaux. [126]

Si cette méthode permet efficacement de réaliser des opérations par le logiciel PARAVIEW, elle n'est pas suffisante pour réaliser l'ensemble des post-traitements souhaités. Parce que le logiciel n'offre pas la possibilité de réaliser simplement l'opération donnée, ou parce que la performance n'est pas suffisante pour obtenir un résultat rapidement, il est apparu comme nécessaire de se doter d'un code dédié au post-traitement. Le principe a été de développer un code sous le paradigme MPI capable de lire les fichiers de résultats obtenus par DYJEAT à l'itération de stockage choisie. Le code offre alors un environnement libre pour réaliser des analyses quantitatives dans un environnement parallèle. Plusieurs fonctionnalités nouvelles adaptées à l'impact de gouttes ont été intégrées dans ce code au cours de la période couverte par cette thèse.

En premier lieu, un développement a été porté par Matthias Averseng au cours de sa thèse pour extraire les données de l'ensemble des structures liquides présentes dans le domaine de calcul. Cet algorithme permet par exemple d'identifier la taille, la vitesse et la sphéricité des gouttes secondaires produites lors d'un processus d'atomisation [127]. Le principe de cet algorithme est d'abord d'assigner une valeur entière (*tag*) unique à chaque cellule contenant du liquide. Puis, une étape de propagation consiste à balayer le domaine et à égaliser le *tag* de deux cellules connectées (en prenant le minimum des deux). Deux cellules sont connectées si elles appartiennent à la même structure liquide : pour cela, on regarde si un des sommets communs aux deux cellules est immergé dans le liquide à l'aide de la reconstruction PLIC faite dans les deux cellules. Après plusieurs itérations de l'étape de propagation, toutes les cellules qui composent une structure liquide se trouvent assignées au même *tag*. Pour obtenir les informations d'une structure donnée, il ne reste qu'à balayer ces cellules et à extraire les informations souhaitées. Si le principe de l'algorithme est simple en apparence, son implémentation efficace dans un contexte MPI comporte quelques subtilités. Une description complète sera fournie dans le manuscrit de thèse de Matthias Averseng.

Des procédures spécifiques au post-traitement d'impact de goutte ont été développées pendant cette thèse, en particulier pour la caractérisation de la couronne liquide produite lors d'un impact normal sur film.

Il s'agit en premier lieu de fixer des critères pour définir la couronne. Pour cela, on repère d'abord l'ensemble des cellules comportant une interface grâce au changement local de signe de la fonction Level Set. La position de ce point est noté en coordonnées cylindriques $\mathbf{x}_\Gamma = (r, \theta, z)$ dans un repère dont l'origine se trouve au niveau du premier point d'impact avec la paroi. On filtre ensuite l'ensemble des points rattachés directement à la goutte impactante en vérifiant que $\|\mathbf{x}_\Gamma - \mathbf{x}_g\| > (R_g + \Delta)$ où le centre de la goutte à l'instant t est repéré à

partir de sa position initiale \mathbf{x}_0 par $\mathbf{x}_g = \mathbf{x}_0 + \mathbf{V}_0(t - t_0)$. Pour filtrer les cellules appartenant à des structures liquides secondaires, on se base sur le *tag* de la structure liquide de plus grande masse obtenu grâce à l'algorithme précédent. Les points obtenus sont rattachés à la couronne liquide.

Des informations supplémentaires sont proposées. Grâce au signe du produit scalaire $\nabla\phi \cdot \mathbf{e}_r$, on peut distinguer la partie externe de la couronne de la partie interne. Un point d'interface situé à la hauteur z_Γ est par ailleurs considéré comme rattaché à un ligament si, à la hauteur z_Γ , il existe au moins un secteur angulaire pour lequel aucun point de couronne n'est repéré.

Une fois que les points appartenant à la couronne sont ciblés, il est très facile d'extraire les caractéristiques de celle-ci (hauteur, profil d'épaisseur, vitesse en tout point, ...) comme on l'illustrera lors du traitement des calculs réalisés au Chapitre 4.

3.3 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons tout d'abord mené une étude approfondie sur un cas de goutte statique permettant de cibler l'origine des courants parasites et d'en réduire significativement l'amplitude. Un travail d'évaluation et d'optimisation des performances a été proposé. Enfin, nous avons discuté de l'évolution imposée des pratiques de calculs en préparation à la simulation d'impacts à haute vitesse. Bien évidemment, de nombreuses perspectives peuvent être dégagées de ces études. En particulier, un travail d'optimisation profond du code nécessiterait un temps dédié pour aborder par exemple les questions de vectorisation ou de portage vers les nouvelles architectures de calcul (accélérateurs GPU). Le code de calcul affiche néanmoins de très bonnes performances parallèles, aussi nous arrêtons les développements numériques à ce stade pour aborder la simulation d'impact de goutte.

4 Etude d'impacts à faible vitesse sur des configurations de la littérature.

Contenu du chapitre

4.1 Etude d'un impact sans <i>splash</i> - prise en compte des effets capillaires en paroi.	90
4.1.1 Retour sur l'angle de contact.	90
4.1.2 Implémentation du modèle d'angle de contact	93
4.1.3 Étude détaillée d'un impact en régime de dépôt. . . .	95
4.2 Etude d'un impact sur film avec <i>splash</i>.	99
4.2.1 Présentation et pertinence du cas d'impact de Cossali et al.	99
4.2.2 Première validation des résultats numériques.	102
4.2.3 Caractérisation de la couronne et des structures secondaires.	103
4.3 Bilan du chapitre.	108

Dans le chapitre précédent, nous avons évalué le comportement du code sur un cas de goutte statique. En 2018 [91], le traitement des différents termes physiques dans le code DYJEAT a été évalué et validé grâce à une série de cas tests élémentaires. Néanmoins, il est audacieux de conclure sur la capacité prédictive du code pour des cas d'impacts à haute vitesse à partir de ces seuls cas tests. Nous l'avons vu en bibliographie, la majorité des travaux expérimentaux ont été menés sur des impacts à vitesse modérée. Il est donc intéressant de confronter le code de calcul à ces cas réels, tant à des fins de validation du code que pour apporter un nouvel éclairage par la DNS 3D sur ces phénomènes.

Parmi les expériences menées sur paroi sèche, les travaux de Yokoi et al. [49] proposent une description détaillée d'un impact en condition de dépôt. Les phénomènes capillaires en paroi ont été caractérisés et étudiés dans des simulations axisymétriques. On se propose donc ici de réaliser une étude complémentaire dans un cas 3D. Cette étude appelle un travail pour le choix et d'implémentation d'une loi permettant la prise en compte des effets capillaires en paroi.

Le *splash* présente plusieurs difficultés numériques, ne serait-ce que par l'aspect multi-échelle des structures liquides créées ou les fortes vitesses engendrées. La formation de couronne liquide a particulièrement été étudiée sur des cas d'impacts sur film liquide. On tentera de reproduire la configuration proposée par Cossali et al. [65] qui ont notamment étudié la formation d'une couronne liquide.

4.1 Etude d'un impact sans *splash* - prise en compte des effets capillaires en paroi.

4.1.1 Retour sur l'angle de contact.

Les phénomènes capillaires en paroi ont été brièvement introduits dans le premier chapitre. On se propose ici de revenir sur la description de cette physique.

La ligne triple, ou ligne de contact, se définit comme l'ensemble des points se trouvant à l'intersection des phases liquide, gazeuse et solide. L'interface liquide-gaz issue de la ligne triple forme avec la paroi un angle que l'on nomme angle de contact (défini côté liquide). Nous l'avons vu en section 2.2, à l'interface liquide-gaz apparaît un différentiel d'énergie de surface traduit par la tension de surface, qui peut aussi être vue comme une force linéique de rappel s'exerçant sur l'interface (rappelons l'homogénéité en unité $N = J.m^{-1}$). Un tel différentiel d'énergie apparaît également à l'interface liquide/solide et gaz/solide. La ligne triple est donc le lieu où ces différentes forces entrent en compétition. Lorsque la ligne triple est immobile, la relation de Young-Dupré permet de donner l'angle de contact en fonction des différentes tensions de surfaces (Eq. 121). On nomme cet angle l'angle de contact statique que l'on note θ_s .

$$\sigma_{sl} + \sigma_{lg}\cos(\theta_s) - \sigma_{sg} = 0 \quad (121)$$

La physique du mouvement de la ligne triple est de loin plus complexe et plusieurs approches peuvent être adoptées pour sa description. Puisque les phénomènes de tension de surface résultent des interactions moléculaires, il peut sembler pertinent de se placer à cette échelle. La dynamique moléculaire considère le mouvement de chaque molécule en interaction électrostatique avec les molécules voisines. Le mouvement de la ligne de contact (qui n'est plus une zone "nette" dans ce cadre) résulte alors du mouvement d'ensemble des molécules. Néanmoins, cette approche est exclue dans le cadre de notre étude car le mouvement de la ligne triple ne représente qu'une petite portion (géométriquement parlant) de notre problème.

Aux échelles macroscopiques, un conflit émerge entre la condition classique d'adhérence du fluide à la paroi et le mouvement tangentiel de la ligne triple à la vitesse U_{cl} . Concilier les deux entraîne une singularité dans l'expression des contraintes visqueuses : en effet, si on considère une vitesse U_{cl} à une petite distance h de la paroi, les contraintes visqueuses $\sim \mu_\ell \frac{U_{cl}}{h}$ tendent vers l'infini lorsque h tend vers 0. Plusieurs approches ont été proposées pour résoudre ce problème apparent, et on se focalisera ici sur l'approche hydrodynamique de Cox-Voinov [128][129] qui est la plus répandue et simple d'utilisation dans notre solveur pour les raisons que nous allons évoquer.

Dans ce modèle, on considère que sur une distance λ , le fluide se déplace en glissant sur la paroi, autorisant ainsi le déplacement de la ligne triple. λ est ainsi appelée longueur de glissement. Tout se passe comme si le fluide glissait sur une paroi déjà mouillée par un film fin. Ce film, dit film précurseur a une

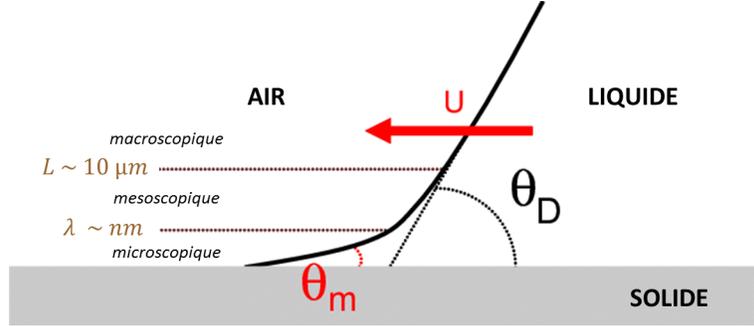


FIGURE 40 – Trois zones définies dans le modèle hydrodynamique. Zone macroscopique, avec angle de contact apparent θ_d et non-glissement défini à la distance L . Echelle mesoscopique de transition. Zone de glissement d'échelle quasi-moléculaire, d'épaisseur λ , avec angle de contact microscopique θ_m . Figure reprise et annotée depuis [130].

réalité physique et a été observé expérimentalement avec des épaisseurs pouvant aller de la molécule à quelques nanomètres. Dans cette zone, l'interface forme un angle microscopique noté θ_m , souvent pris égal à l'angle statique θ_s . A une distance L de l'interface (de l'ordre de quelques microns), une condition de non glissement est adoptée et l'angle de contact prend la valeur de l'angle dynamique apparent noté θ_d . Entre ces deux zones se trouve une zone de raccordement où l'angle de contact s'infléchit sous les effets visqueux et capillaires (Fig. 40).

Plusieurs modèles relient l'angle de contact dynamique apparent à la vitesse de la ligne triple U_{CL} , en se basant éventuellement sur l'angle microscopique ou les longueurs λ et L . Ces modèles font quasi-systématiquement intervenir le nombre capillaire $Ca = \frac{U_{CL}\mu_\ell}{\sigma_{\ell g}}$. Dans la partie suivante, on utilisera le modèle développé par Yokoi [49] à partir de la loi de Tanner [131]. Ce modèle (Eq. 122, Fig. 41) n'utilise pas de longueurs de glissement mais se base sur des observations expérimentales pour établir les angles maximum d'avancée et de recul ($\theta_{mda}, \theta_{mdr}$), ainsi que des constantes (k_a, k_r) liées à la nature du matériau.

$$\theta_D = \begin{cases} \min \left[\theta_s + \left(\frac{Ca}{k_a} \right)^{1/3}, \theta_{mda} \right] & \text{if } U_{CL} \geq 0, \\ \max \left[\theta_s + \left(\frac{Ca}{k_r} \right)^{1/3}, \theta_{mdr} \right] & \text{if } U_{CL} < 0, \end{cases} \quad (122)$$

Nous avons évoqué le modèle hydrodynamique et l'approche moléculaire. D'autres descriptions du mouvement de l'interface ont été réalisées. Citons notamment la théorie cinétique moléculaire [132] ou le modèle de Shikhmurzaev [133]. Ce dernier propose que le fluide se déplace "en roulant" sur la paroi aux abords de la ligne de contact et exprime la

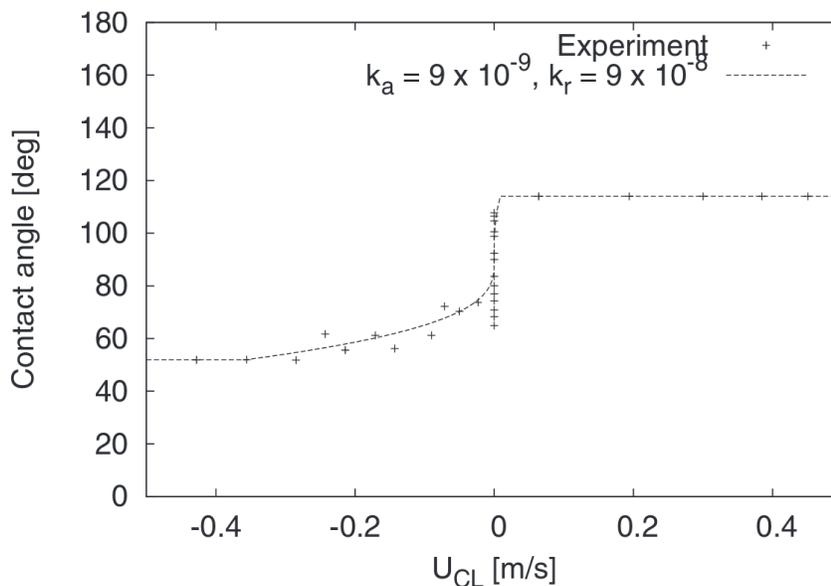


FIGURE 41 – Loi liant l’angle de contact apparent à la vitesse de la ligne triple. Etabli par Yokoi et al. [49] pour de l’eau sur une plaque siliconée. $\theta_{mda} = 114^\circ$, $\theta_s = 90^\circ$, $\theta_{mdr} = 52^\circ$, $k_a = 9.0 \times 10^{-9}$, $k_r = 9.0 \times 10^{-8}$.

dissipation d’énergie en utilisant à la fois l’hydrodynamique classique et la thermodynamique hors équilibre en prenant en compte la création et destruction d’interfaces lors du roulement. Blake, en 2006, propose une discussion intéressante mettant en regard les différentes approches pour un approfondissement du sujet [134]. Ajoutons également que ces différentes descriptions ont été particulièrement étudiées sur des mouillages naturels mais dans une moindre mesure sur des cas de mouillages forcés.

L’approche hydrodynamique présente un intérêt particulier dans le cadre de notre étude. En premier lieu, les DNS d’impact de gouttes représentent un coût important et il n’est pas question ici de raffiner pour capter une physique fine aux abords de la ligne de contact telle que celle décrite par Shikhmurzaev. Rappelons en effet que si on considère une goutte d’un millimètre de diamètre, mailler à un micron (maillage grossier si on veut capter correctement cette physique) représente déjà en ordre de grandeur un milliard de points dans le domaine. Les approches moléculaires impliqueraient le couplage avec un code de dynamique moléculaire qu’il faudrait développer ; le domaine de calcul de l’approche continue devrait également être très raffiné. Pour ces raisons, nous excluons cette option.

Le modèle hydrodynamique propose en revanche une approche à l’échelle de quelques microns en introduisant l’angle de contact apparent. De plus, dans

le code DYJEAT, la vitesse tangentielle la plus proche de la paroi est située à une demi-maille de celle-ci (maillage décalé). On introduit donc naturellement une longueur de coupure finie qui permet d'éviter le problème de singularité des contraintes visqueuses ; expliciter une longueur de glissement n'est ainsi pas forcément nécessaire [49]. L'enjeu est donc de pouvoir intégrer au code un modèle tel que celui décrit dans l'équation (122) liant l'angle de contact apparent à la vitesse de la ligne triple.

4.1.2 Implémentation du modèle d'angle de contact

L'approche numérique choisie consiste à modifier la géométrie de la ligne de contact en conditions aux limites. Cela se traduit concrètement par une modification de la fonction Level-Set dans les cellules de gardes situées sous la paroi. Nous suivons ainsi la méthode proposée par Griebel et Klitz [135], en continuité avec la technique d'extension de Sussman [136]. L'intérêt de la méthode est de ne pas avoir à localiser explicitement l'interface, mais d'imposer la condition aux limites sur la Level Set :

$$\frac{\partial \phi}{\partial y}_{paroi} = -\cotan(\theta_D) \sqrt{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{paroi}^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)_{paroi}^2} \quad (123)$$

Si géométriquement, la conditions aux limites $\phi_y = -\cos(\theta_D)$ suffit, Griebel et Klitz montrent que la formulation (123) permet de pallier le fait que la condition $\|\nabla \phi\| = 1$ n'est pas toujours parfaitement respectée (résolution numérique de l'équation de redistance).

Pour la norme du gradient projeté sur la paroi, nous employons une discrétisation centrée basée sur la première rangée de cellules proches de la paroi :

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(i, j - 1/2, k) = \frac{\phi(i + 1, j, k) - \phi(i - 1, j, k)}{2\Delta} \quad (124)$$

Il reste alors à définir l'angle de contact en tout point $\theta_D(i, j, k)$.

L'utilisation d'une loi d'angle de contact comme (122) permet le calcul des angles au niveau de la ligne de contact. La seule difficulté est de déterminer si on se trouve dans un cas d'avancée ou de recul de la ligne de contact. Pour cela, on calcule simplement le signe du produit scalaire $\mathbf{u} \cdot \nabla \phi$. En cas de signe positif ou négatif, la ligne triple recule ou avance (respectivement). Rappelons à cette occasion que nous avons choisi la convention $\phi > 0$ dans le liquide et $\phi < 0$ dans le gaz.

Comme la condition aux limites sur ϕ doit être imposée en tout point de la frontière, il faut également donner une valeur numérique à l'angle de contact en dehors des cellules contenant la ligne triple. Pour cela, on se propose d'étendre la valeur calculée en paroi en résolvant l'équation tirée de [123] en tout point de la paroi :

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} - S(\phi) \mathbf{n}_s(\phi) \cdot \nabla_s \theta = 0 \quad (125)$$

où τ est un temps fictif et l'indice s désigne la projection du vecteur sur la paroi. Cette équation traduit une propagation de l'angle de contact depuis la ligne de contact en suivant la direction donnée par le vecteur normal de ϕ . Le préfacteur $S(\phi)$ désignant le signe de la Level Set permet une extension des deux côtés de la ligne de contact. A la suite de cette résolution, on obtient ainsi un champ 2D d'angle de contact sur toute la paroi.

Les angles de contact sont stockés au centre des cellules de pressions et indicés (i, k) . La discrétisation de $\mathbf{n}_s(\phi)$ se base sur la Level Set dans la première rangée de cellule, en utilisant un schéma aux différences finies décentré amont pour le gradient [123] :

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i,k} = \frac{1}{\Delta} \begin{cases} \phi_{i,1,k} - \phi_{i-1,1,k} & \text{si } \phi_{i-1,1,k} \leq \min \{ \phi_{i,1,k}, \phi_{i+1,1,k} \} \\ \phi_{i+1,1,k} - \phi_{i,1,k} & \text{si } \phi_{i+1,1,k} \leq \min \{ \phi_{i,1,k}, \phi_{i-1,1,k} \} \\ 0 & \text{si } \phi_{i,1,k} \leq \min \{ \phi_{i-1,1,k}, \phi_{i+1,1,k} \} \end{cases} \quad (126)$$

Le signe de ϕ est évalué comme pour le cas de l'équation de redistance et un lissage est employé (Eq. 86). Le gradient d'angle de contact est évalué en employant un schéma WENO3 suivant le même principe que ce qui avait été présenté dans les équations (49) à (55). Enfin, la discrétisation temporelle est effectuée en employant une méthode Euler explicite avec un pas de temps fictif correspondant à une demi-maille (comme pour le cas de la redistance, la vitesse est unitaire). Notons qu'une grande précision dans la méthode numérique n'est pas nécessaire car on ne résout pas l'équation (125) sur les cellules à la ligne triple (où sont définis initialement les angles de contact) : ainsi la "source" de l'information reste préservée. Un cas de validation illustrant le fonctionnement de l'algorithme est proposé en Figure 42.

Il reste à évoquer la façon dont l'implémentation proposée va représenter numériquement les effets capillaires en paroi. Seules les cellules de garde sont modifiées par la condition (123). En notant $\beta(\phi, \theta_D)$ le second membre de cette équation, on fixe les valeurs de la Level Set dans les cellules de garde comme :

$$\begin{aligned} \phi_{i,0,k} &= \phi_{i,1,k} - \beta(\phi, \theta_D) \Delta \\ \phi_{i,-1,k} &= \phi_{i,0,k} - \beta(\phi, \theta_D) \Delta \\ \phi_{i,-2,k} &= \phi_{i,-1,k} - \beta(\phi, \theta_D) \Delta \end{aligned} \quad (127)$$

Ces cellules ne sont pas utilisées directement dans le calcul d'advection car le flux de ϕ à travers la paroi est nul ($v_{i,-1/2,k} = 0$). Elles interviennent de façon minoritaire dans la reconstruction de l'interface en bord de paroi (voir le faible poids accordé aux cellules voisines dans l'équation 81). En revanche, la première rangée de cellules de garde intervient de manière non négligeable dans le calcul de la courbure locale. Le saut de pression à la traversée de l'interface est tel que la géométrie locale de l'interface dans le domaine de calcul va s'ajuster, sous les effets capillaires, à la géométrie imposée sous la paroi.

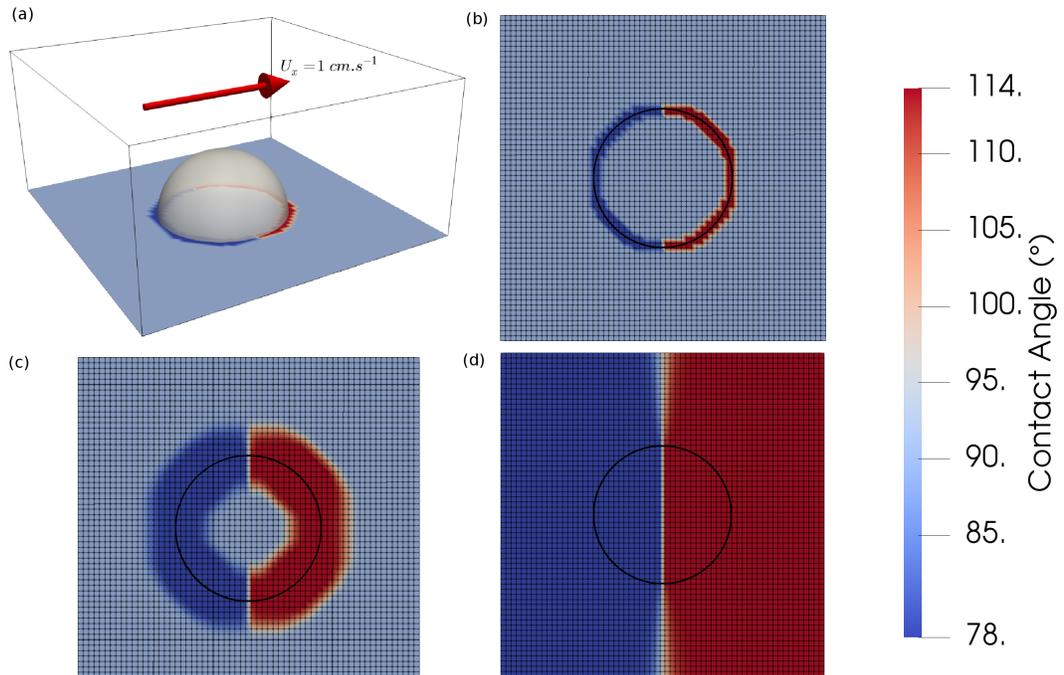


FIGURE 42 – Evolution du champ d’angle de contact sur le cas d’une hémisphère liquide initialisée avec une vitesse de $1\text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$. (a-b) : angles de contact calculé à l’interface à partir de la loi proposée par Yokoi (122) ; la vitesse étant uniforme, un angle d’avancée et de recul sont obtenus sur la moitié avant et arrière de l’hémisphère. (c) Champ obtenu après 15 itérations de l’algorithme. (d) Champ obtenu après convergence de l’algorithme.

Il apparaît comme probable que l’intensité de la force de rappel ainsi générée va être très dépendante à la manière de calculer la courbure locale. Il reste donc à évaluer sur un cas concret si l’implémentation choisie permet bien de représenter ces effets capillaires.

4.1.3 Étude détaillée d’un impact en régime de dépôt.

Dans cette partie, nous étudions une configuration expérimentale proposée par Yokoi et al [49]. Il s’agit d’un impact d’une goutte d’eau de 2.28 mm de diamètre atteignant une paroi lisse et sèche à une vitesse $V = 1\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Le substrat est une couche de silicium sur laquelle a été greffé un substrat hydrophobe en silane. La paroi est considérée comme lisse (rugosité inférieure à 50 nm). Cette configuration présente plusieurs intérêts qui justifient son choix pour notre étude.

En premier lieu, l’impact se place dans un régime de dépôt pour lequel la

dynamique d'étalement est influencée par la nature de la paroi. Yokoï et al. fournissent un suivi du diamètre d'étalement et confirment cette dépendance à la paroi à l'aide de simulations axisymétriques. Les relevés expérimentaux sont obtenus à partir de l'analyse d'images obtenues à l'aide d'une caméra rapide (10.000 fps avec une résolution 448x338 px). Au préalable, les auteurs ont mesuré l'angle de contact sur ce substrat en fonction de la vitesse et ont formulé la loi présentée précédemment (Fig. 41 et Eq. 122). Le caractère lisse de la paroi a été quantifié ce qui n'est pas toujours le cas dans les publications de la littérature et vaut la peine d'être noté.

Cette étude propose donc des données de choix pour notre étude : il s'agira ici de valider notre implémentation d'un modèle d'angle de contact en utilisant la loi (122). Pour cela, on mesurera le diamètre d'étalement et comparera aux données expérimentales. De plus, il sera intéressant de montrer la sensibilité de la dynamique d'étalement à la loi d'angle de contact en étendant les résultats en trois dimensions.

Les Figures 43 et 44 présentent une comparaison qualitative des résultats de simulation avec la vue caméra de Yokoï. On observe aux mêmes instants une forme similaire de la goutte, en particulier sur la phase d'étalement qui coïncide de façon remarquable. Un léger décalage est visible sur la fin de la phase d'étalement, attribué à la propagation d'ondes capillaires dans l'expérience qui ne sont pas visibles dans la simulation.

De façon plus quantitative, on peut mesurer le diamètre d'étalement et comparer aux données obtenues par Yokoï et al. Pour cela, on localise toutes les cellules à l'interface au bord de la paroi sur le critère $\phi_{i,1,k}\phi_{i+ii,1,k+kk} < 0$ avec (ii, kk) compris entre -1 et 1 permettant de balayer les cellules voisines. On note toutes ces positions d'interface et on calcule la distance au centre. Cette procédure permet de quantifier la déviation à l'axisymétrie sur l'étalement de la goutte. Sur le cas présenté en Figure 44, cette déviation est inférieure à 1% du diamètre moyen.

Les résultats de l'analyse associés à une convergence en maillage sont proposés en Figure 45. On observe un très bon accord et une convergence en maillage à partir d'une résolution de 29 points par diamètre, ce qui représente un coût relativement faible. En particulier, le diamètre maximum d'étalement et le diamètre final sont correctement prédits.

Ces calculs ont été réalisés avec un suivi d'interface purement basé sur la Level-Set. Avec un suivi d'interface couplé avec le VOF comme décrit au Chapitre 2, il est nécessaire d'employer des résolutions égales ou supérieures à 58 cellules par diamètre pour l'obtention de résultats similaires. En effet, lors de l'étalement, l'épaisseur liquide se réduit à l'arrière du bourrelet à quelques dizaines de microns. Cette épaisseur est de l'ordre de l'échelle de la maille et conduit à la fragmentation à cet endroit au début de la phase de rétraction (Figure 46).

Sur une configuration de dépôt, la dynamique d'étalement est fortement liée aux effets capillaires et donc à la loi d'angle de contact choisie. Ce résultat

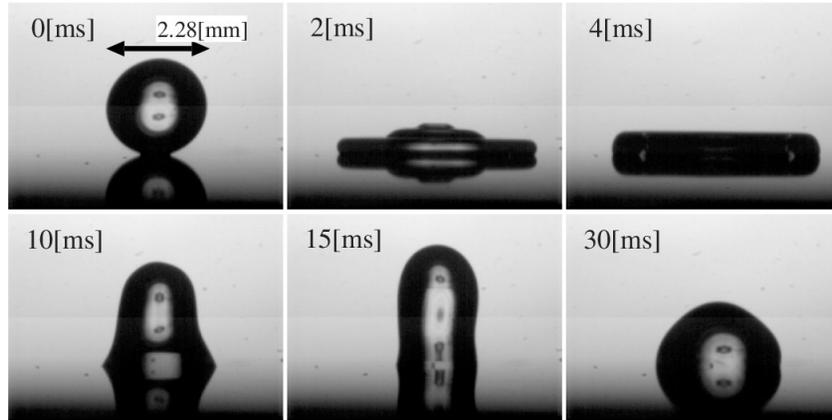


FIGURE 43 – Impact d’une goutte d’eau de 2.28 mm de diamètre à 1 m.s^{-1} sur substrat hydrophobe. La goutte reste en paroi après l’étalement et la rétraction : on obtient un régime de dépôt. Extrait de Yokoï et al. [49].

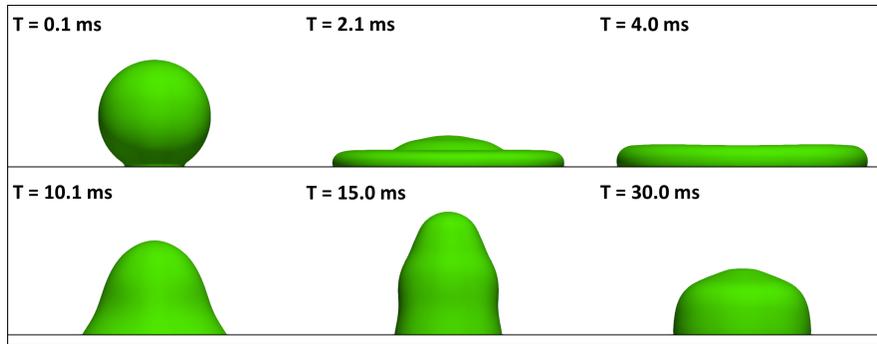


FIGURE 44 – Simulation DYJEAT avec $\Delta = 39 \mu\text{m}$ pour un total de 8.3 millions de cellules. Utilisation de la loi d’angle de contact dynamique (Eq.122).

avait été mis en évidence sur ce cas par Yokoï et al. [49] à l’aide de simulations axisymétriques. On retrouve ici ce résultat sur un cas 3D. En effet, lorsque l’on supprime la dépendance de l’angle de contact à la vitesse locale pour imposer une valeur à 90° (valeur à l’équilibre), la topologie de l’impact se trouve modifiée (Figure 47) : on obtient un recul beaucoup plus rapide que pour le cas précédent conduisant au rebond partiel de la goutte. La phase d’avancée est peu influencée par l’angle de contact. Le nombre de Weber basé sur l’épaisseur du film liquide et sur la vitesse d’étalement est de l’ordre de 25 à $T=1\text{ms}$, ce qui explique un comportement similaire en début de simulation. Ce nombre de Weber se réduit progressivement en fin de phase d’avancée et les effets capillaires deviennent de l’ordre des effets inertiels, entraînant une forte dépendance à l’angle de contact dans la dynamique.

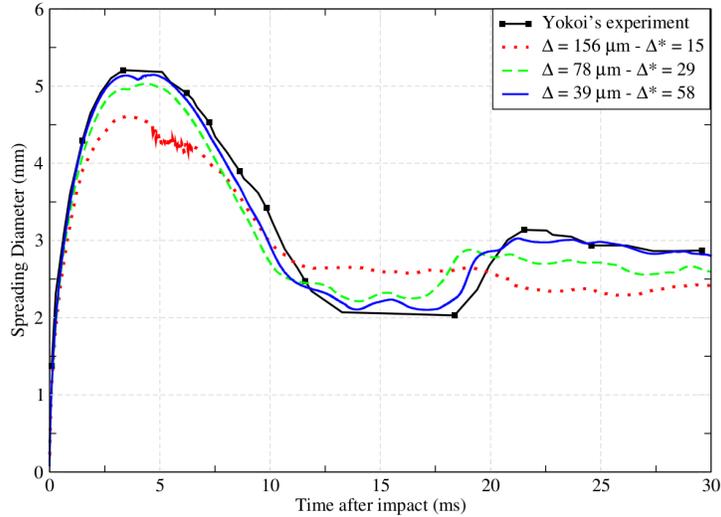


FIGURE 45 – Mesure du diamètre d'étalement sur différents maillages en comparaison aux expériences de Yokoi et al. $\Delta^* = D/\Delta$ quantifie le nombre de points dans le diamètre de la goutte initiale.

Brève discussion sur la méthode employée

Comme nous l'avons vu, la méthodologie choisie ici permet de reproduire le comportement de la ligne triple lors du mouvement, sous peine que l'on choisisse une loi d'angle de contact adaptée. Les constantes de la loi (122) avaient été choisies dans [49] pour que les simulations axisymétriques donnent des résultats en accord avec les expériences. Malgré cela, et malgré la différence de méthode numérique employée pour la résolution de Navier-Stokes, ainsi que la différence 3D-axi, nos résultats sont en accord avec ceux de Yokoi et al. Ceci démontre une certaine "robustesse" de la loi et de son implémentation.

Remarquons également que la loi de Yokoi sature aux angles θ_{mda} et θ_{mdr} . Dans le cas eau/air et avec les constantes de Yokoi, cette saturation a lieu à une vitesse de $0.9cm.s^{-1}$ et $-35cm.s^{-1}$ pour les phases d'avancée et de recul respectivement. Dans notre contexte SLD, l'avancée des lignes de contact se situe bien au delà de ces vitesses. Aussi, la loi de Yokoi se résume concrètement à un saut entre angle maximum d'avancée et de recul. Dans un cas de déplacement de goutte comme celui présenté en Figure 42, ce saut d'angle de contact induit une déstabilisation du code, car il induit une brusque variation de la géométrie imposée au niveau de la condition aux limites (donc de la courbure locale, donc du second membre dans l'équation en pression). Fort heureusement, notre étude s'intéresse particulièrement à la formation du splash et à la phase d'étalement. Aussi, au cours des simulations d'impacts que nous étudierons au chapitre sui-

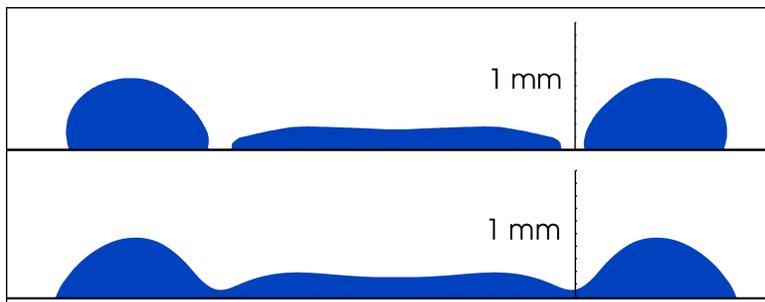


FIGURE 46 – Simulation 3D avec le couplage Level Set et Volume of Fluid - Vue en coupe. $T = 5.5$ ms, début de phase de rétractation. (haut) : $\Delta = 78\mu\text{m}$ et $\Delta^* = 29$. (bas) : $\Delta = 39\mu\text{m}$ et $\Delta^* = 58$.

vant (hors impact très rasants, on le verra), l'ensemble des points de la ligne de contact seront simultanément en phase d'avancée, associée à un angle de contact saturé θ_{mda} .

Notons enfin que nous avons éludé la question de l'*hystérésis*. L'hystérésis se définit comme une plage d'angles de contact possibles avec une vitesse de ligne triple immobile (voir les points expérimentaux correspondants sur la Figure 41 à $U_{CL} = 0$). Ce comportement n'est pas considéré dans notre approche, où l'angle de contact est une fonction de la vitesse de la ligne de contact. On constate que cette simplification ne nuit cependant pas à nos résultats dans l'étude précédente. De plus dans le cadre SLD on ne s'intéressera pas à la transition étalement/rétractation et on considère donc raisonnable de négliger l'hystérésis.

4.2 Etude d'un impact sur film avec *splash*.

Nous avons montré la capacité du code à simuler des impacts en régime de dépôt, grâce au travail mené pour la prise en compte des effets capillaires en paroi. Mais dans le cadre SLD, on s'attend également à obtenir des situations de *splash*. Il est donc nécessaire, avant d'utiliser le code comme outil prédictif dans ces situations, d'évaluer sa pertinence sur une configuration de *splash* en se basant sur les travaux de la littérature.

4.2.1 Présentation et pertinence du cas d'impact de Cossali et al.

Les travaux de Cossali et al. [65] proposent l'étude d'une goutte d'eau de diamètre $D = 3.82$ mm, impactant à la vitesse V sur une épaisseur liquide de hauteur h . Quatre vitesses sont étudiées sur la plage [2.3 m.s⁻¹ – 4.4 m.s⁻¹]. L'épaisseur liquide est adimensionnée par le diamètre de goutte ($h^* = h/D$); trois épaisseurs sont étudiées $h^* \in \{0.29; 0.67; 1.13\}$. L'intérêt de cette configuration est qu'elle conduit à la formation d'une couronne liquide et à la production de gouttes secondaires (Fig. 48), deux points que l'on souhaitera

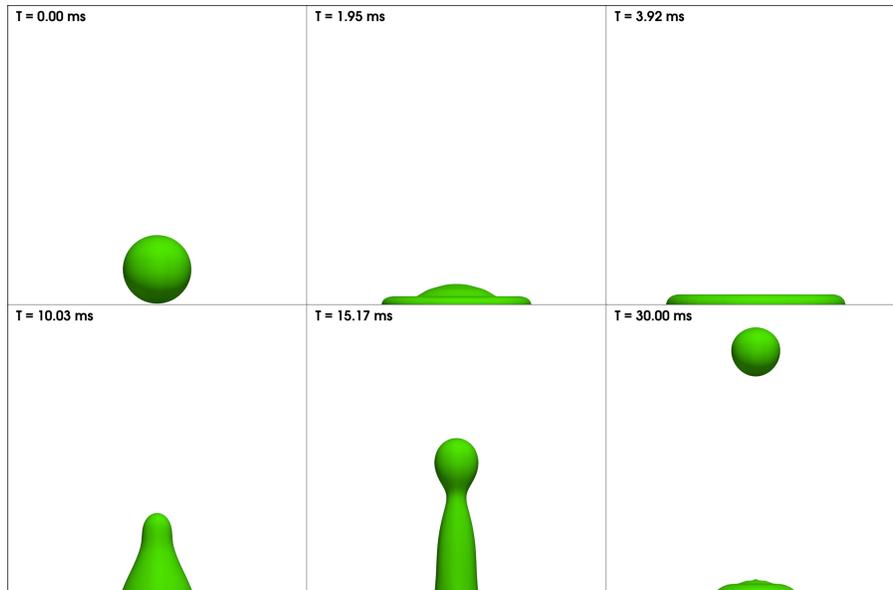


FIGURE 47 – Impact d’une goutte d’eau de 2.28mm de diamètre à $1\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ sur substrat hydrophobe. $\Delta = 39\mu\text{m}$ et $\Delta^* = 58$. Loi d’angle statique $\theta = 90^\circ$. Une situation de rebond est obtenue.

étudier par la suite.

Parmi les travaux disponibles dans la littérature sur des configurations similaires, l’étude de Cossali et al. se distingue par la quantité et la précision des mesures, en particulier sur la couronne. Le système d’acquisition se compose d’une caméra CCD (PCO Flashcam 752x286) et d’un flash (durée du flash de $10\mu\text{s}$), déclenché lors du passage de la goutte à travers un faisceau laser avec un délai pour paramètre d’ajustement. Les auteurs obtiennent donc une image par impact, et parviennent à reconstituer l’ensemble du processus en variant le délai de déclenchement du flash et en s’appuyant sur une très bonne reproductibilité de l’expérience (quantifiée dans [65]). Les images sont prises de côté (Fig. 48) ou par le dessous via un système de miroir.

Ces deux angles de vue permettent de définir quatre mesures différentes du diamètre de couronne au cours du temps. Deux de ces mesures, D_{ue} et D_{le} , sont visibles sur la Fig. 48, tandis que les deux autres sont définies à partir de la vue du dessous et les auteurs ne l’associent pas à une hauteur de mesure définie. La hauteur de couronne est également mesurée. Les caractéristiques géométriques des gouttes secondaires sont obtenues à partir de l’analyse des images obtenues de la vue de côté. Les vitesses de ces structures ne sont donc pas fournies. Les auteurs ne parviennent pas à corréler la taille de ces gouttes secondaires à l’épaisseur de couronne, la mesure de cette dernière étant soumise

à une incertitude importante.

L'expérience de Cossali et al. fournit donc des données intéressantes pour valider la capacité du code à simuler un *splash*. Par ailleurs, l'utilisation de cet outil peut apporter un nouvel éclairage sur les questions restées ouvertes dans ce papier, que ce soit l'approche retenue pour la caractérisation de la couronne ou celle des gouttes secondaires.

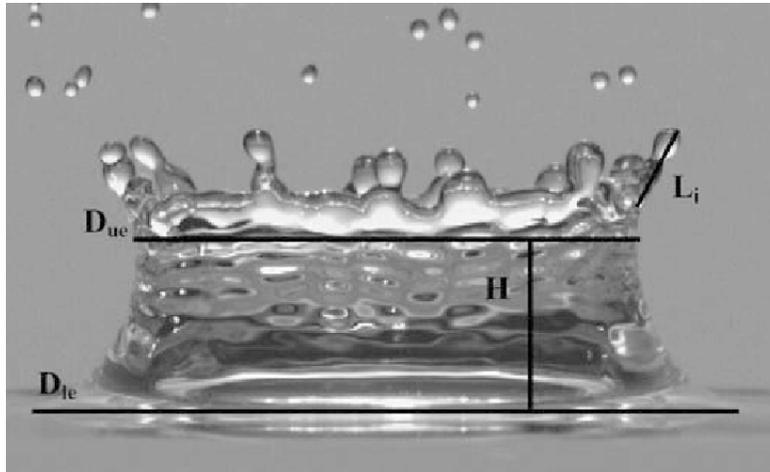


FIGURE 48 – *Splash* en couronne produit lors de l'impact d'une goutte de diamètre $D = 3.82mm$ un film d'épaisseur $h = 2.57 mm$ ($h^* = 0.67$) à $V = 3.51 m.s^{-1}$. Des gouttes secondaires sont émises lors du processus. Figure reprise de [65].



FIGURE 49 – Simulation sur quart de goutte, maillage 512^3 , $\Delta = 30 \mu m$, $\Delta^* = 127$ cellules par diamètre initial de goutte. 512 cœurs de calculs, 150.000 h.cpu.

4.2.2 Première validation des résultats numériques.

Dans un premier temps, on souhaite comparer les résultats du code aux mesures de couronne proposées par Cossali. Cependant les auteurs fournissent l'essentiel de leurs résultats expérimentaux sous forme de loi permettant d'approcher leurs données et non de données brutes, ajoutant une incertitude à la comparaison. Une configuration échappe à ce format et les quatre diamètres mentionnés précédemment sont proposés dans [65], et seront repris en Figure 54. Parmi les quatre diamètres, le diamètre mesuré sous le bourrelet semble être le meilleur candidat pour la comparaison car c'est celui pour lequel la définition du point de mesure est la plus claire. L'autre candidat pourrait-être la mesure « à la base de la couronne », dont nous verrons que la définition est plus problématique.

Un résultat de simulation est proposé en Figure 49. Cette simulation, réalisée sur quart de goutte au mésocentre CALMIP⁴, montre l'émergence d'une couronne liquide, l'émission de jets liquides à son extrémité ainsi que des gouttes secondaires déjà émises. Qualitativement, la simulation se place en très bon accord avec le résultat expérimental présenté en Figure 48. Notons également que le cratère provoqué par l'impact est suffisamment profond pour chasser le liquide du centre et la paroi se trouve temporairement démouillée.

De façon plus quantitative, nous mesurons le diamètre de couronne à la base du bourrelet D_{ue} au cours du temps. A ce stade, il paraît complexe de déterminer rationnellement et automatiquement la hauteur de mesure pour ce diamètre à chaque instant. Cette mesure est de plus rendue plus difficile au cours du temps du fait de la non symétrie de la couronne autour de l'axe central. Le hauteur de mesure pour le diamètre a donc été choisie à la main comme ont pu le faire Cossali et al. et cette mesure est entachée d'une erreur. Cette erreur a été quantifiée en prenant les extrêmes des hauteurs de mesures jugées « raisonnablement acceptables » et cumulée à l'erreur due à l'asymétrie de la couronne. L'erreur totale induite sur le diamètre est bornée à 3% des valeurs mesurées.

En Figure 50, on présente la mesure du diamètre sous le bourrelet au cours du temps. Les points expérimentaux sont associés à leur erreur de mesure, évaluée en cumulant les différentes incertitudes évoquées dans [65]. Deux simulations avec la méthode CMOM pour deux résolutions différentes sont présentées. L'erreur de mesure sur la simulation est reportée sur le maillage le plus fin uniquement pour la lisibilité. Il est intéressant de noter que ces deux simulations donnent un résultat quasi-identique sur la mesure du diamètre ce qui indique une convergence en maillage.

Une simulation réalisée avec la méthode Level-Set conduit à une erreur très importante; en début d'impact, une instabilité numérique se produit et parasite le reste du calcul en amenant une part de l'erreur. En Figure 51, on note également l'absence totale de génération de gouttes secondaires ou de début de

4. Mésocentre CALMIP - <https://www.calmip.univ-toulouse.fr/> - Calculateur OLYMPE pour 2018/2022 - 13.464 coeurs Intel SKYLAKE 6140 - 48 cartes GPU VOLTA100.

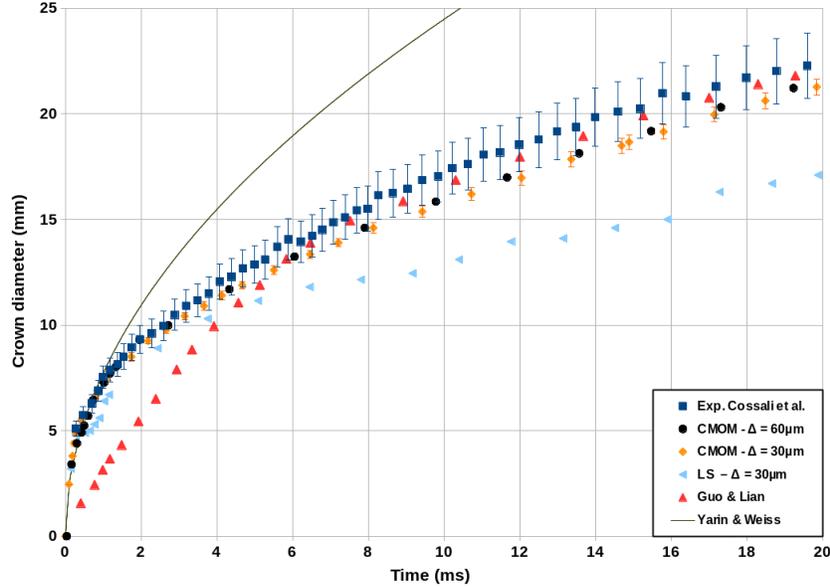


FIGURE 50 – Diamètre de couronne mesuré à la base du bourrelet. Données mesurées par Cossali [65], résultats de nos simulations 3D (méthodes LS et CMOM), résultats obtenus par Guo & Lian en 2016 [52], modèle de Yarín & Weiss [61].

jet. On démontre ici l'intérêt et la force des méthodes robustes et conservatives présentées au Chapitre 2 pour la simulation d'impact de goutte.

A titre comparatif, nous traçons également les résultats publiés en 2016 par Guo et al. [52] issus de simulation 3D avec la méthode *Moment Of Fluid* (MOF). Notons une différence importante en notre faveur en début d'impact, et des résultats proches sur le reste du calcul. Comme constaté par Cossali et al., le modèle de Yarín & Weiss [61], s'appuyant sur Levin et al. [137], échoue à prédire la dynamique de couronne. Pour être plus précis, ce modèle surestime le diamètre de couronne au delà de $T = 1\text{ms}$, soit $\tau = TV/D \sim 1$. L'hypothèse fluide parfait ou la non-prise en compte de la composante normale de la vitesse dans le film pourraient être de bons candidats pour expliquer cet écart.

A partir de la comparaison visuelle précédente et de la mesure du diamètre, on considère la simulation CMOM réalisée à $\Delta = 30 \mu\text{m}$ comme suffisamment fiable pour la caractérisation des grandeurs macroscopiques de la couronne.

4.2.3 Caractérisation de la couronne et des structures secondaires.

Pour aller plus loin dans l'analyse, il est apparu nécessaire de se doter d'un code de post-traitement dédié. En effet, la taille de ces simulations (plusieurs

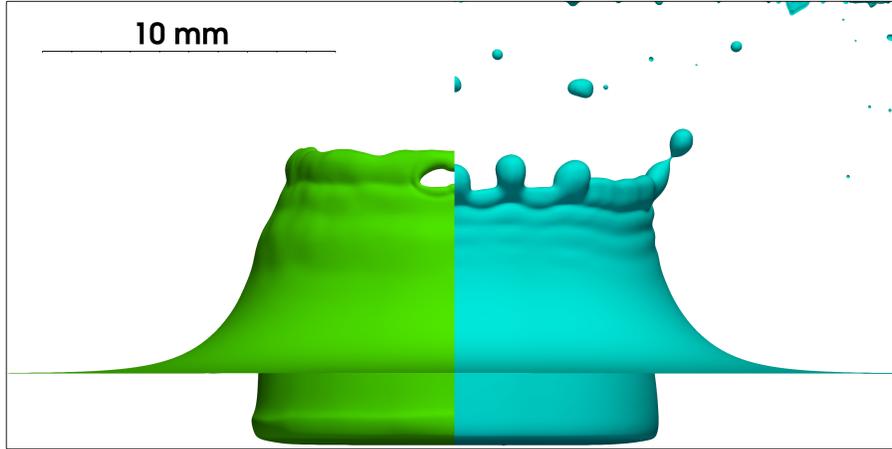


FIGURE 51 – Profils de couronne obtenus à iso-maillage $\Delta = 30 \mu m$ avec une méthode Level Set (à gauche) et CMOM (à droite). On note l’absence de jet en limite de couronne.

centaines de millions de points) met en avant les limites des post-traitements effectués via une interface graphique (opérations intégrées à l’interface de Paraview par exemple). Une brève présentation de cet outil et de son intérêt a été proposée au Chapitre 3. Ici, on localise l’ensemble des interfaces présentes dans les cellules de calcul et on les attribue au côté intérieur ou extérieur de la couronne en prenant soin de filtrer les autres points relevés. A partir d’un stockage en coordonnées cylindriques, on peut obtenir un profil de couronne moyenné selon θ (Fig. 52). Ce type de profil est riche d’information car il nous donne facilement accès à l’épaisseur de couronne en tout point (Fig. 53). Ce profil 3D moyenné est en soi un résultat nouveau et important car, du fait des difficultés d’accès expérimentaux notamment, il n’est pas proposé en littérature à la connaissance de notre équipe de recherche.

Le tracking de l’épaisseur minimale de couronne permet de donner une définition rationnelle de la hauteur de mesure du diamètre D_{ue} . Les résultats sont très similaires à ceux proposés en Figure 50 ce qui appuie la faible incertitude liée à cette mesure. En revanche, les trois autres diamètres proposés par Cossali sont bien plus difficiles à positionner. Le diamètre à la base est extrêmement dépendant de la hauteur de mesure, tandis que les diamètres définis “par dessous” ne sont pas positionnés du tout. Pour représenter l’impact d’une incertitude de la définition sur le diamètre obtenu, on se propose de tracer l’ensemble des diamètres obtenus pour toute les hauteurs (*i.e.* pour chaque $y(j)$ de la discrétisation de l’axe y). Le résultat, visible en Fig. 54 montre la variété des résultats obtenus en fonction de la définition choisie. Notons tout de même une concentration du nuage de points autour des points expérimentaux correspondant aux cellules d’interfaces

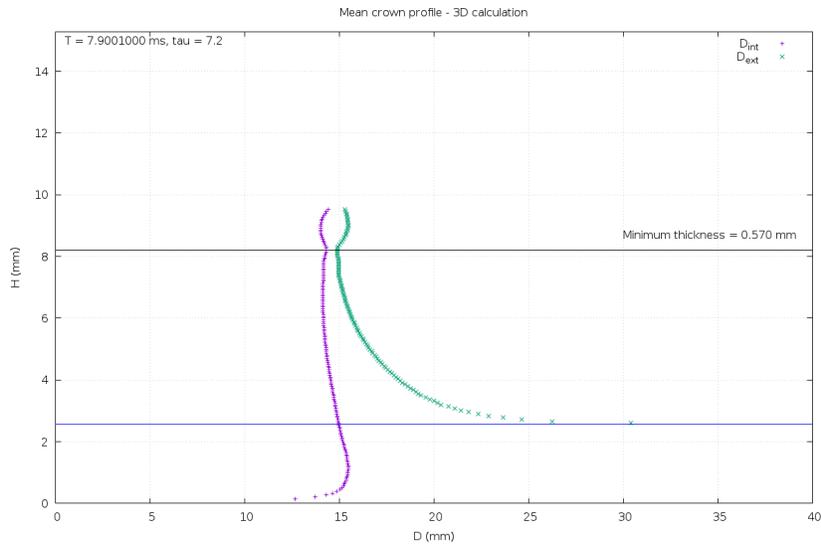


FIGURE 52 – Profil de couronne obtenu à partir du calcul à $\Delta = 30 \mu m$. Calcul 3D moyenné selon l’azimut, seuls les points appartenant à la couronne sont retenus. La hauteur initiale de film est ajoutée (trait bleu à $h = 2.57 \text{ mm}$) et on repère l’épaisseur minimale de couronne sous le bourrelet. Ici, mesure à 7.9 ms .

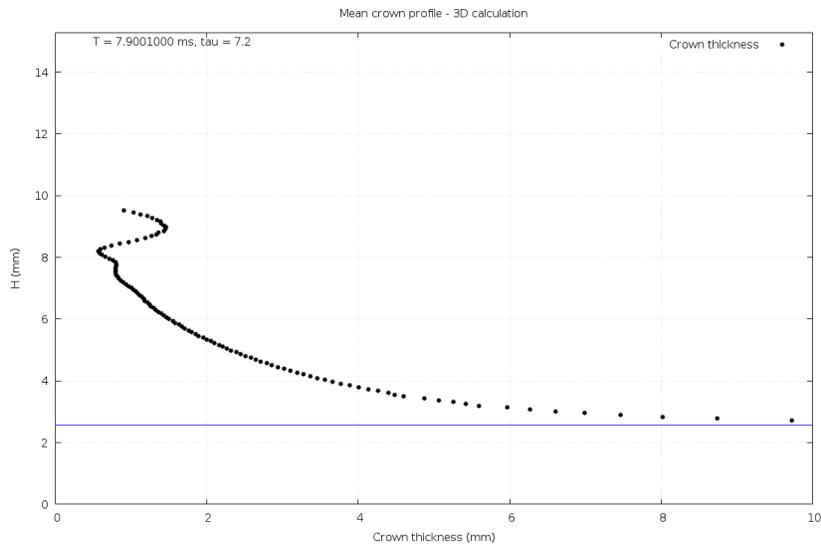


FIGURE 53 – Profil d’épaisseur obtenu au même instant. On note ici l’épaisseur minimale sous le bourrelet. On montre ici également l’ambiguïté de la définition du “Diamètre à la base” de la couronne, du fait de son épaisseur importante.

repérées entre le film et la base du bourrelet.

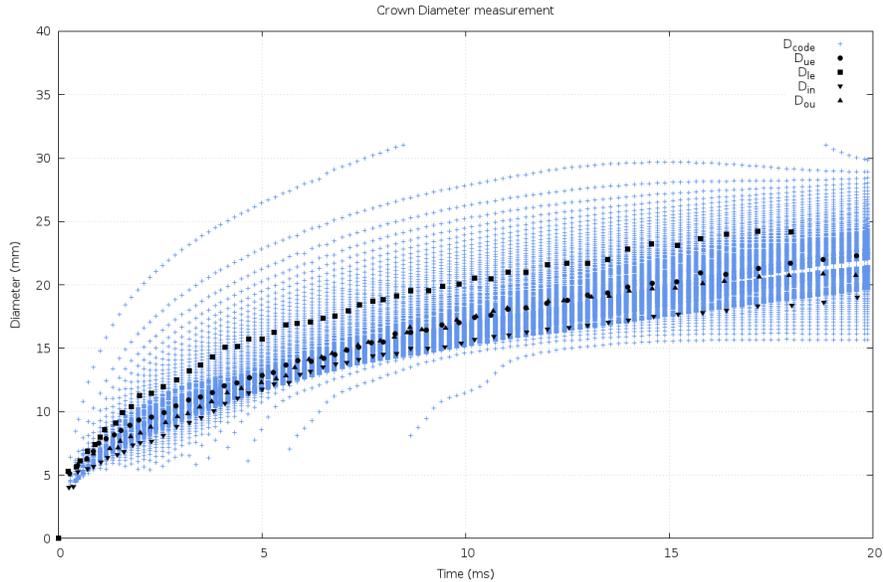


FIGURE 54 – Diamètres obtenus pour chaque hauteur $y(j)$, représentés aux côtés des mesures de Cossali et al. Le positionnement de la mesure permet de couvrir une large plage de résultats.

Lors de l’impact, des gouttes secondaires sont éjectées, et nous avons déjà montré que les calculs Level Set ne permettaient pas de les capter. En s’appuyant sur la méthode CMOM, on met en évidence un effet de maillage important dans la distribution obtenue. Visuellement (Figure 55), on observe avec la grille fine des gouttes plus tôt dans la simulation, qui sont à la fois plus petites et plus rapides.

L’effort particulier porté sur l’outillage du code pour le post-traitement (Chapitre 3) permet également de quantifier ce phénomène. La distribution associée à la Figure 55 est proposée en Figure 56. Plusieurs remarques se dégagent de cette distribution. Contrairement aux grandeurs macroscopiques de couronne, la prévision des gouttes secondaires est bien loin d’être convergée, et un maillage plus fin serait intéressant pour appuyer ce point. De façon surprenante, on n’obtient pas les mêmes résultats sur les grosses gouttes, qui sont bien résolues sur les deux grilles, et on suppose ici que le maillage apporte également un délai de déclenchement des instabilités car les jets sont bien présents dans les deux cas en Figure 55.

Sur les gouttes les plus fines, on en compte évidemment un plus grand nombre sur la grille fine. D’expérience empirique avec le code, des gouttes peuvent “survivre” si leur diamètre satisfait le critère $D \geq 2\Delta$. Cependant, on constate sur

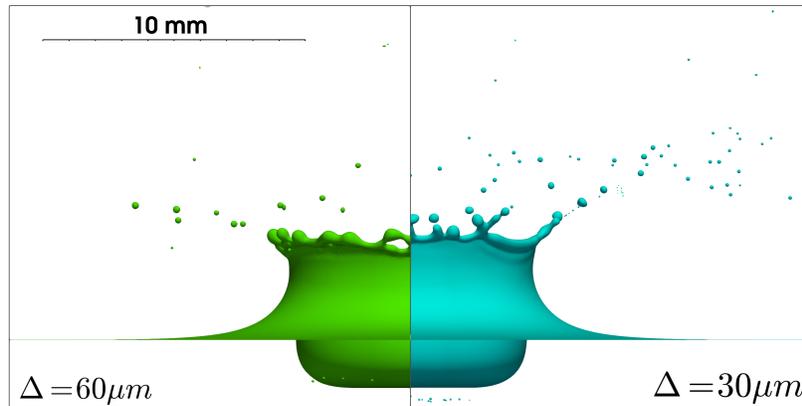


FIGURE 55 – Convergence en maillage à $t=2.5ms$, lorsque la quasi-totalité des gouttelettes ont été générées. A gauche : $\Delta = 60 \mu m$. A droite : $\Delta = 30 \mu m$. Visuellement, le maillage raffiné permet de capturer des gouttes plus nombreuses, plus petites et plus précoces.

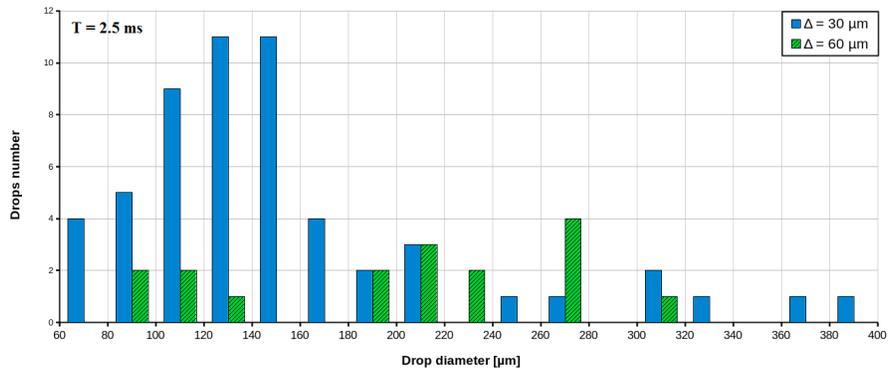


FIGURE 56 – Distribution en taille obtenue à $t=2.5 ms$ sur un quart de domaine. En vert rayé : $\Delta = 60 \mu m$. En bleu uni : $\Delta = 30 \mu m$.

cette figure qu'un nombre important de gouttes de diamètre supérieur à $120 \mu m$ (soit $2 \times \Delta_{60}$) ne sont pas présentes sur la grille grossière alors qu'elles pourraient exister. Ici le maillage n'est donc pas suffisant pour capturer leur mécanisme de formation. De cette expérience et de la distribution obtenue, il apparaît plutôt que pour capturer la formation de gouttes secondaires, la résolution doit être au minimum de l'ordre de $\Delta = 4D$ du diamètre des gouttes obtenues. Ce critère est cohérent avec le pic de gouttes obtenu sur la grille fine à $120 \mu m$ ($4 \times 30 \mu m$) et sur la grille grossière autour de $240 \mu m$ ($4 \times 60 \mu m$).

4.3 Bilan du chapitre.

Dans ce chapitre, nous avons d'abord proposé une implémentation d'un modèle d'angle de contact pour la prise en compte des effets capillaires en paroi. Cette implémentation permet de reproduire de façon satisfaisante une configuration expérimentale sur un régime de dépôt et montre l'importance du choix de la loi et de ses paramètres dans le résultat obtenu. L'implémentation choisie pourra permettre d'explorer l'influence des effets de mouillabilité sur d'autres régimes d'impact, en particulier sur les configurations à haute vitesse. Dans un second temps, nous avons mis en évidence la nécessité de méthodes conservatives, précises et robustes pour la simulation de l'atomisation lors d'un impact sur film. Si les caractéristiques macroscopiques de la couronne peuvent être reproduites à moindre coût, la simulation de production de gouttes secondaires demande des ressources importantes. Un effort particulier a été mis pour aller au-delà de la validation et extraire des informations pertinentes de la masse importante de données générées par la DNS. Si ce travail s'est focalisé sur une caractérisation des résultats obtenus, des travaux en cours visent à les comparer finement aux modèles actuels dans la perspective d'une publication prochaine.

A ce stade, on considère donc le code et les outils comme suffisamment matures pour aborder de façon exploratoire des configurations à plus haute vitesse. C'est l'objet du chapitre suivant.

5 Impact de goutte en régime SLD : étude paramétrique pour la prédiction du *splash* et du taux de masse déposée en paroi

Contenu du chapitre

5.1	Approche expérimentale sur l'impact de goutte .	109
5.1.1	Set-up expérimental	109
5.1.2	Traitement des acquisitions et dimensionnement des calculs	111
5.2	Etude par simulation numérique directe.	115
5.2.1	Ecart à l'expérience et influence de la nature de la cible sur la topologie obtenue.	115
5.2.2	Effet de la densité de l'air sur le <i>splash</i>	117
5.2.3	Influence de l'angle d'impact sur le <i>splash</i>	118
5.3	Bilan du chapitre.	120

Dans ce chapitre, nous abordons la simulation d'impact à haute vitesse en appuyant notre étude sur des expériences menées à l'ONERA. Dans un premier temps, le dispositif expérimental et quelques résultats obtenus seront brièvement présentés. La contribution de cette thèse pour le volet expérimental a consisté à post-traiter une part de ces résultats, au delà de l'échange avec les expérimentateurs. La discussion de ces résultats, éclairée par les simulations réalisées, a amené de nouveaux essais, déjà réalisés ou prévus.

A l'aide de l'outil numérique, nous explorons l'incidence de plusieurs facteurs sur le régime d'impact : on s'intéressera notamment à la présence d'un film liquide sur la paroi, au rôle de la densité de l'air dans l'impact, ou à l'effet de l'angle d'impact tout en discutant les résultats pour construire la démarche.

5.1 Approche expérimentale sur l'impact de goutte

Dans cette section, on décrira brièvement le montage expérimental et les principaux résultats obtenus. Il ne sera pas ici question d'une description exhaustive et détaillée de l'ensemble des travaux réalisés, mais suffisante pour faire le lien avec l'approche numérique proposée dans cette thèse. Aussi, pour plus de détails, le lecteur est invité à se référer aux travaux publiés sur le sujet [80].

5.1.1 Set-up expérimental

Le principe général du banc expérimental (évoqué dans le Chapitre 1) est de générer un train de gouttes de diamètre contrôlé, d'accélérer ces gouttes à l'aide d'un écoulement d'air au sein d'un convergent, et d'enregistrer le résultat des impacts successifs à l'aide d'un système d'acquisition adapté.

La génération des gouttes se fait à l'aide d'un injecteur monodisperse et le train de gouttes résultant est contrôlé à l'aide d'une caméra. Ces gouttes

chutent sous l'effet de la gravité et sont accélérées par un écoulement d'air. Lors du trajet dans le convergent, le rétrécissement de la section impose une accélération de l'air. Le convergent a été dimensionné pour que cette accélération soit suffisamment progressive pour ne pas fragmenter les gouttes sous l'effet du cisaillement. La hauteur du convergent, d'1.80 m, limitée par la hauteur de la pièce dans laquelle se trouve l'installation, permet d'atteindre des vitesses de gouttes de près de 60 m.s^{-1} .

L'air qui entraîne les gouttes est préalablement humidifié afin de réduire l'évaporation des gouttes pendant leur chute. Avant l'entrée dans le convergent, l'air traverse une chambre de tranquillisation et un nid d'abeille permettant de laminariser l'écoulement.

Plusieurs cibles d'impact et dispositifs de mesures ont été utilisés selon l'objectif souhaité : on retiendra trois configurations pour cette étude dont un aperçu est proposé en Figure 57 .

La première est une plaque en aluminium polie, inclinable, sous laquelle a été disposé un bac de collecte permettant la capture du liquide qui ruisselle le long de la plaque après impact. La pesée de l'eau résultant d'une série d'impacts permet de quantifier la quantité d'eau restant en paroi. On définit ainsi le taux de dépôt comme le rapport entre la masse restant en paroi lors d'un impact et la masse de la goutte impactante. Cette configuration, dont les résultats avaient été présentés en Figure 25, a permis de mettre en évidence la dépendance du taux de dépôt avec l'angle d'impact. Sur les impacts rasants, la masse déposée est faible et croît avec l'angle d'impact. Au-delà d'un angle critique, un comportement de plateau est observé et le taux ne dépend plus de l'angle d'impact. Notons que dans l'expérience, la partie de la plaque ouverte à la collecte est ajustée en fonction de l'angle étudié afin d'éviter une collecte des gouttes n'impactant pas la cible placée au dessus du dispositif.

La deuxième est une lame d'aluminium polie sur laquelle on focalise une caméra rapide. L'arrivée de la goutte est détectée lors de son passage au travers d'un faisceau laser qui déclenche un flash après un délai contrôlé. Lors d'un même impact, deux paires d'images sont prises : la première paire juste avant l'impact permet d'évaluer les caractéristiques de la goutte impactante, et la seconde permet de visualiser l'impact résultant. Dans la section suivante, nous évaluerons la reproductibilité des résultats obtenus et verrons sous quels moyens il est possible d'obtenir une animation couvrant tout l'impact à partir des données brutes.

Le système d'acquisition est identique pour la troisième configuration dans laquelle la cible d'impact est un cylindre de diamètre largement supérieur à celui des gouttes : ainsi, chaque goutte va impacter avec un angle différent la cible selon la position du point d'impact sur le cylindre. L'intérêt est, à l'aide d'une seule cible immobile, d'explorer un large panel d'angle d'impact. La contrepartie est celle d'avoir un champ de visée large avec la caméra pour pouvoir capter l'ensemble de ces impacts : ainsi des résultats macroscopiques tels que la limite dépôt/rebond peuvent être captés, mais la résolution est alors insuffisante pour aborder la physique fine de l'impact.

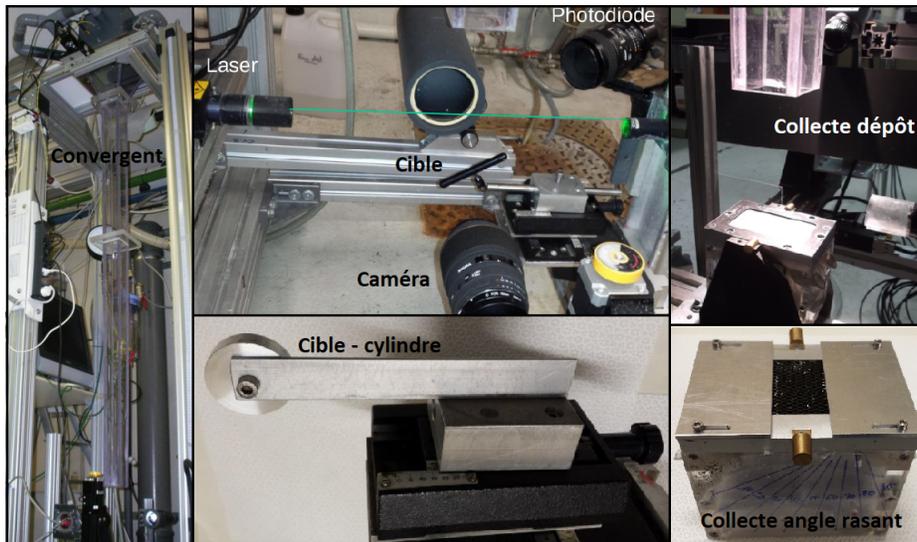


FIGURE 57 – Extrait du système expérimental. Convergent, système d’acquisition et extraits des cibles utilisées pour les essais.

5.1.2 Traitement des acquisitions et dimensionnement des calculs

On s’intéresse ici au traitement des données enregistrées à l’aide de la caméra rapide, qui correspond à la seconde configuration décrite précédemment. Comme dit précédemment, chaque impact résulte en deux paires d’images. La première paire d’image permet de localiser la goutte avant l’impact à un intervalle de temps contrôlé (de l’ordre de quelques dizaines de μs). Une série d’images type avant traitement est proposée en Figure 58.

Le traitement de ces données a été fait en développant un script de traitement d’image sous le logiciel ImageJ⁵. Ce script permet dans un premier temps de filtrer l’ensemble des images non-exploitable (délai non ajusté, impacts multiples ou en dehors de la zone de visée, goutte non sphérique), qui représentent 40 % des impacts enregistrés lors d’une configuration (plus de 1500 impacts traités pour une même vitesse d’air). De façon surprenante, pour une même vitesse d’air et un train de gouttes supposé monodisperse en entrée de convergent, la distribution de gouttes enregistrées est apparue comme non monodisperse. Plusieurs diamètres apparaissent de façon privilégiée avec des vitesses similaires (Figure 59). Plusieurs hypothèses peuvent être soulevées pour expliquer ce fait. Il n’est pas impossible que pendant les essais, et malgré le contrôle réalisé au préalable, l’injecteur n’ait pas généré un train monodisperse. De plus, lors de la vie des gouttes dans l’écoulement, des collisions (entre gouttes ou avec les parois) peuvent se produire, tout comme des mécanismes de coalescence. Malgré

5. ImageJ est un logiciel open source développé en Java - infos et téléchargement : <https://imagej.net>.



FIGURE 58 – Données type enregistrées lors d’un impact. Deux images séparées de $\Delta t \sim 40 \mu s$ avant l’impact sont fusionnées en une seule image pour l’analyse. Une seconde paire d’images est prise après un délai ajustable ($\Delta t \sim 50 \mu s$). Le délai séparant ces deux dernières images est limité par l’intervalle entre deux *flash* successifs, de l’ordre de $\Delta t \sim 5 \mu s$.

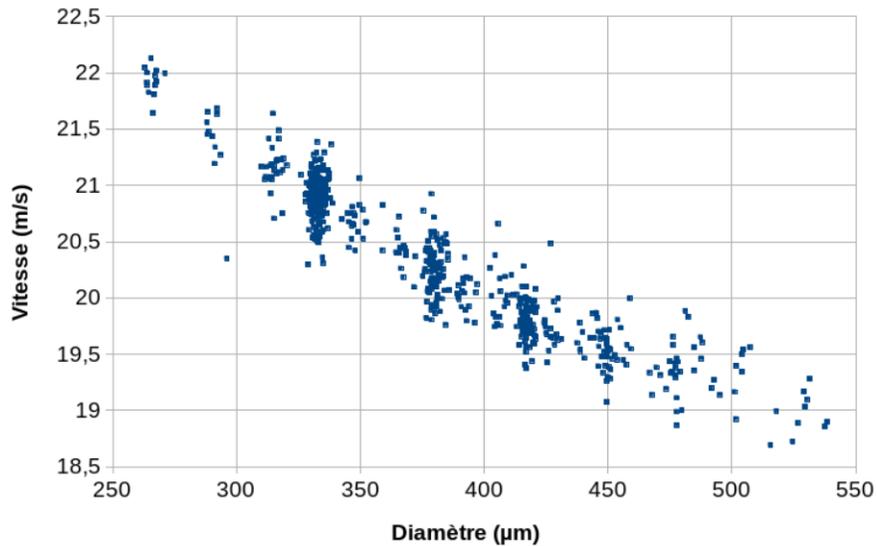


FIGURE 59 – Diamètre et vitesses des gouttes recensées sur une configuration d’impact ($V \sim 20 m.s^{-1}, D \sim 400 \mu m$). Chaque point représente un impact enregistré. Plusieurs diamètres apparaissent de façon privilégiée.

le dimensionnement du convergent, l’existence locale de cisaillement suffisant pour fragmenter les gouttes est une hypothèse plausible également.

Pour sélectionner un impact particulier, on impose un filtrage supplémentaire pour choisir un diamètre et une vitesse avec une marge d’erreur contrôlée. Sur cette configuration, il reste alors à ré-ordonner les images obtenues en fonction du temps et à les recentrer sur le point d’impact pour obtenir une séquence d’images sur tout le processus. Pour comparer les différentes configurations, on raisonne avec le temps adimensionné $t^* = \frac{(t-t_{impact})V}{D}$ où t_{impact} correspond à l’instant du contact.

Sur la Figure 60, on compare trois impacts de gouttes de diamètres similaires $D \sim 410\mu m$ pour des vitesses différentes, au même temps adimensionné $t^* = 0.55$ (la goutte a parcouru la moitié de son diamètre). Sur les trois configurations, on note un comportement similaire : un *splash* en couronne se forme, avec une couronne très déstabilisée. De nombreux ligaments et gouttes secondaires sont formés. Lorsque la vitesse augmente, les gouttes secondaires sont plus nombreuses et plus petites. Sur la configuration haute vitesse, les plus petites gouttes sont sub-microniques et de vitesse importante : en ordre de grandeur, un flou de bougé est visible sur quelques pixels ($\sim 3\mu m$) malgré une durée d’impulsion de la diode de quelques dizaines de nanosecondes, ce qui indique une vitesse supérieure à 100 m.s^{-1} pour une vitesse d’impact de la goutte initiale de 45 m.s^{-1} .

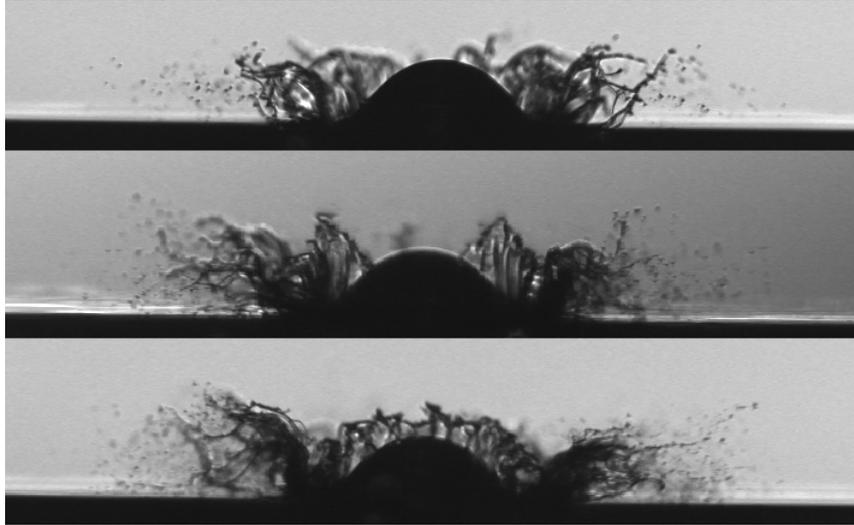


FIGURE 60 – Trois impacts représentés au même temps adimensionné $t^* = 0.53$. De haut en bas : $\{D, V\} = \{(418\ \mu m, 19.8\text{ m.s}^{-1}); (395\ \mu m, 33.5\text{ m.s}^{-1}); (411\ \mu m, 46.5\text{ m.s}^{-1})\}$. Tolérance acceptée sur le diamètre et la vitesse pour la sélection des images à 1%.

Si on considère un calcul d’un quart de goutte sur un domaine $[0; D]^3$, capturer la formation des gouttes d’un micromètre implique, d’après le retour d’expérience fait au Chapitre 4, d’utiliser une résolution $\Delta \sim 250\text{ nm}$. Une telle configuration équivaldrait à un maillage de près de 4 milliards de mailles, avec une utilisation d’environ 15000 cœurs de calcul, soit la mobilisation de 25% de l’actuel supercalculateur Jean-Zay⁶ à l’IDRIS (centre national) pendant une

6. Présenté au Chapitre 3 - 1528 noeuds de calcul équipés de de processeurs Intel Cascade Lake 6248 (20 cœurs cadencés à 2.5GHz), plus 261 noeuds équipés des mêmes processeurs avec en supplément 4 GPU Nvidia V100 SXM2. Entrée en production fin 2019 - Voir www.idris.fr/jean-zay.

durée d'un mois environ (facturation de l'ordre d'10M d'h.cpu), et ce pour un seul calcul. Rappelons que notre objectif initial est d'étudier l'effet de plusieurs paramètres physiques sur l'impact. Dans ce cadre, un tel dimensionnement de calcul n'est pas accessible.

Du fait de la similarité des trois impacts proposés en Figure 60 et du coût de calcul que les impacts à forte vitesse représentent pour notre étude, on choisit de se restreindre dans cette étude à la configuration à vitesse qualifiée de "modérée" à 20 m.s^{-1} . Notons que cette configuration reste rare en comparaison des impacts que l'on peut trouver en littérature comme rappelé en Chapitre 1. Néanmoins, cette configuration implique tout de même, selon le prédimensionnement précédent, un maillage de quelques centaines de millions de points. De plus, une configuration quart de goutte n'est adaptée par définition qu'à des impacts normaux et les impacts obliques doivent être traités sur des demi-gouttes au moins. Enfin un domaine de taille $[0; D]^3$ n'est pas suffisant pour traiter de l'ensemble du processus d'étalement : rappelons pour l'exemple que dans l'impact de Yokoï étudié au Chapitre 4, et malgré la faible vitesse, le diamètre maximum atteint par la goutte était déjà de plus de deux fois le diamètre initial. On s'attend ici à un étalement plus important.

Face à cette gestion nécessaire de la ressource en calcul, nous avons fait le choix de l'étude de trois domaines différents, avec la résolution Δ^* associée ($\Delta^* = D/\Delta$). Ces configurations, de taille de domaine variable selon l'angle d'impact, sont données dans la Table 6 :

Config.	Domaine	Δ^*
C1	$[0; 1.8D]^3$ à $[-1.6D; 1.6D] \times [0; 1.8D]^2$	466
C2	$[0; 3.6D]^3$ à $[-3.2D; 3.2D] \times [0; 3.6D]^2$	233
C3	$[0; 7.2D]^3$ à $[-6.4D; 6.4D] \times [0; 7.2D]^2$	117

TABLE 6 – Configurations choisies pour les calculs d'impact à haute vitesse.

Chaque configuration a pour but d'explorer des phénomènes et des temps de simulation différents. La configuration C1 permet de se focaliser sur les premiers instants de l'impact ($t_{max}^* \sim 0.7$) et l'initiation du *splash*. La configuration C3 permet au contraire d'étudier les phénomènes d'étalement, à plus grande échelle et sur des temps plus longs. La configuration C2 permet de faire le pont entre les deux et d'étudier l'impact du maillage sur la simulation de chacun de ces deux phénomènes (en déraffinant pour le *splash*, et en raffinant pour l'étalement).

Chaque calcul sur ces configurations représente une charge similaire, avec un maillage pouvant dépasser le milliard de points, un temps de calcul de l'ordre de quelques semaines et un coût pouvant atteindre le million d'heures CPU.

Aussi, l'analyse de ces données lourdes (plusieurs dizaines de To) a nécessité la mise en place de pratiques adaptées comme décrit brièvement au Chapitre 3, tout comme les quelques optimisations qui ont permis de réduire le coût des calculs en eux-mêmes. La campagne de calcul s'est terminée avec l'arrêt de la machine TURING de l'IDRIS en Octobre 2019 pour un coût total estimé à 30M d'heures CPU, et les analyses sont toujours en cours. Dans la suite du chapitre, on s'intéressera essentiellement à la configuration C1 qui a été traitée en priorité pour l'étude du déclenchement du *splash*.

5.2 Etude par simulation numérique directe.

5.2.1 Ecart à l'expérience et influence de la nature de la cible sur la topologie obtenue.

La configuration expérimentale retenue comme référence pour les calculs est l'impact d'une goutte de diamètre $D = 420 \mu m$ à la vitesse $V = 20 m.s^{-1}$. Le résultat de la simulation en configuration C1 est donné en Figure 61. Sur ce calcul, il apparaît un écart important dans la topologie de l'impact obtenu. En effet, dans l'expérience se forme une couronne liquide perturbée qui n'est pas du tout obtenue dans notre simulation. De cette problématique, plusieurs hypothèses peuvent être explorées.

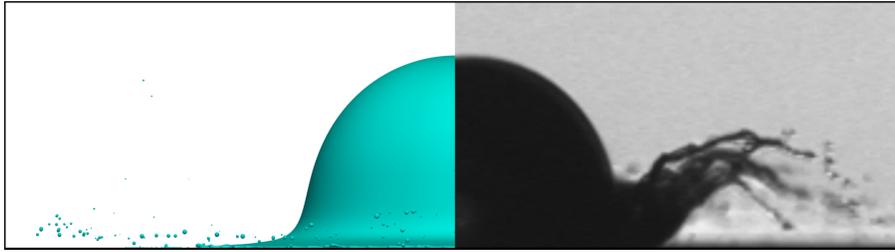


FIGURE 61 – Gauche : calcul sur la configuration de référence $D = 420 \mu m$ et $V = 20 m.s^{-1}$ à $t^* = 0.35$. Configuration C1 : $\Delta = 900 nm, \Delta^* = 466$. Droite : Configuration expérimentale de référence au même temps.

Un questionnement peut venir sur l'hypothèse faite sur la nature de la paroi. En effet, si l'on a considéré ici la paroi comme parfaitement sèche, dans l'expérience les impacts sont enregistrés les uns après les autres et il n'est pas impossible qu'un film résiduel soit présent. L'obstacle principal à cette remise en question est que ce film n'est pas visible sur l'expérience, et que deux impacts successifs sont généralement séparés d'une distance égale à plusieurs dizaines de diamètres, laissant le temps à l'écoulement d'air de chasser l'eau en paroi. De ces oppositions émerge le fait que, si un film existe bel et bien, son épaisseur ne peut-être que de quelques microns. Il reste à savoir si un film d'une telle finesse ($h^* < 10^{-2}$) peut influencer la nature de l'impact dans le régime étudié. Afin d'étudier l'influence d'un film mouillant la paroi sur la topologie d'impact,

on réalise une série de simulations avec plusieurs hauteurs de films, dont les résultats sont présentés en Figure 62.

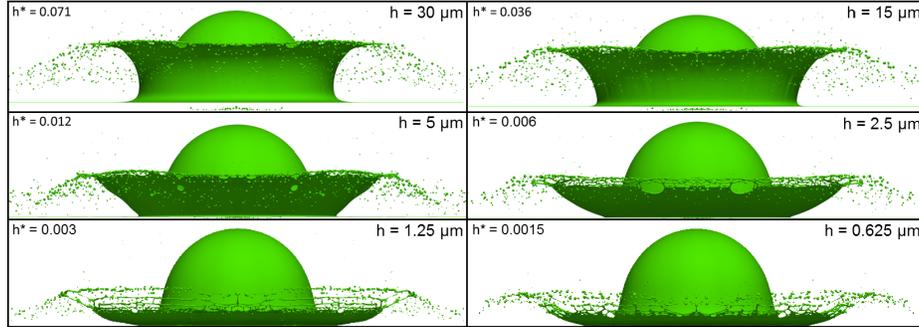


FIGURE 62 – Etude de l’influence d’un film liquide sur la nature de l’impact. Résultats présentés à $t^* = 0.33$. $\Delta = 900 \text{ nm}$, $\Delta^* = 466$.

On constate que, quelle que soit la hauteur de film considérée, un *splash* en couronne est déclenché, et ce même pour une hauteur de 625 nm . Sur cette dernière configuration, la couronne est d’épaisseur comparable à la taille de la maille et se rompt rapidement dans le processus. On note également que l’angle formé entre l’horizontale et la couronne tend à augmenter avec l’épaisseur de film. Aux épaisseurs importantes, la couronne émerge verticalement. A l’inverse, à faible épaisseur, la couronne émerge quasiment parallèlement à la paroi. Ce comportement suit qualitativement la description fournie par Fedorchenko et al. [64]. Quantitativement, la comparaison avec la loi proposée en Equation (16) est gênée par la difficulté de définir précisément un tel angle, induisant une incertitude de mesure trop importante pour effectuer une comparaison.

Nous avons vu que la définition de la cible d’impact pouvait être déterminante sur la topologie obtenue. Dans cette optique, on peut également s’interroger sur l’affinité entre la paroi et le liquide. Pour tester cette hypothèse, deux simulations ont été réalisées avec une loi d’angle de contact statique de 60° et 120° . Aucune différence n’a été obtenue en comparaison de la simulation présentée en Figure 61, qui avait été réalisée avec un angle statique de 90° . Pour expliquer cette absence de dépendance, notons que la lamelle liquide émerge en début de calcul avec une vitesse de l’ordre de 80 m.s^{-1} pour une épaisseur de l’ordre du micron. Le nombre de Weber basé sur ces grandeurs est de l’ordre de 10^2 , indiquant que l’inertie domine largement les effets capillaires. Notons que le nombre de Reynolds est du même ordre : les effets visqueux sont également négligeables devant l’inertie mais sont d’ordre comparable avec les effets capillaires ($Ca \sim 1$).

Il reste à évoquer les effets éventuels de la rugosité de paroi. La remise en question de l’hypothèse de paroi lisse a conduit à des mesures de

rugosité courant 2019 qui ont dévoilé une rugosité arithmétique moyenne $R_a = 1.23 \mu m$. Il est évident que cette rugosité, de l'ordre de l'épaisseur de la lamelle liquide qui émerge en début d'impact, peut avoir une influence importante sur la topologie de l'impact.

Nous avons exploré différentes hypothèses et montré qu'une définition plus contrôlée de la paroi était nécessaire pour effectuer une comparaison avec le calcul qui suppose une paroi parfaitement lisse. La présence d'un film résiduel ou des rugosités importantes peuvent ainsi expliquer la différence dans la topologie obtenue, tout comme la variabilité et les asymétries constatées dans les différents impacts enregistrés lors de l'expérience. Pour la suite, on se servira donc du code comme d'un outil exploratoire pour étudier l'influence de grandeurs physiques sur un impact à haute vitesse.

5.2.2 Effet de la densité de l'air sur le *splash*.

Les travaux de Xu et al. [39] ont montré expérimentalement l'influence de la pression de l'air ambiant dans le déclenchement du *splash*. En particulier, ils ont montré une suppression possible du splash en abaissant la pression. Plus récemment les travaux de Burzynski et al. [28] tentent de déterminer quelle propriété du gaz affecte réellement le *splash*, et proposent la densité comme grandeur physique de premier ordre.

Ici, on souhaite savoir si la densité de l'air peut bien avoir une telle influence sur le *splash*, dans le cadre d'une approche incompressible et sur une configuration haute vitesse. Pour cela, on réalise une simulation à rapport de densité augmentée $\rho_g = 12k g.m^{-3}$. Une comparaison avec le calcul à densité ambiante est proposée en Figure 63.

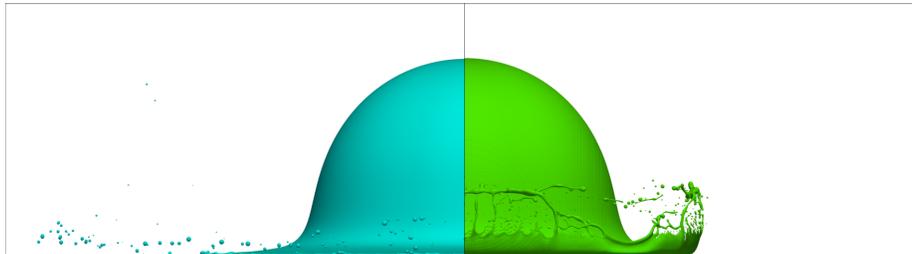


FIGURE 63 – Mise en évidence du rôle de la densité de l'air dans le processus de splash. A gauche : $\rho_g = 1.2 kg.m^{-3}$ - un *prompt splash* est obtenu. A droite : $\rho_g = 12 kg.m^{-3}$ - La lamelle liquide se décolle et une couronne se forme.

Dans cette figure, on montre qu'en augmentant la densité de l'air, il est possible de modifier la topologie du *splash* obtenu puisqu'on obtient ici une forme de couronne. Cette couronne se destabilise avec l'apparition de ligaments et l'émission de gouttes secondaires. Notons qu'avec une épaisseur de couronne de l'ordre de la maille, l'utilisation du VOF tend à favoriser la fragmentation en

gouttelettes. Au dessus de la lamelle liquide, un tourbillon se forme provoquant l'aspiration de la goutte. A l'inverse, une surpression se forme sous la lamelle, de sorte que le ΔP de part et d'autre de celle-ci est de l'ordre d'1 bar. Dans la suite du calcul, la couronne se rompt et une partie du liquide reste en paroi en s'étalant.

On montre ici que sous les seuls effets incompressibles, il est possible de provoquer un *splash* en couronne, sans aucune considération des effets non continus décrits au Chapitre 1 (*skating* sur une lamelle d'air sous la lamelle liquide de quelques dizaines de nm). Ce comportement a été confirmé sur une autre configuration réalisée en dehors de la campagne de calcul décrite précédemment, avec une tenue plus longue de la couronne du fait d'une vitesse d'impact plus importante (Figure 64). Sur ce calcul, la similitude avec les résultats expérimentaux de la Figure 60 semble indiquer (malgré la différence de ρ_g) qu'une fois que la couronne est initiée, sa destabilisation peut être capturée de façon précise par le code de calcul.

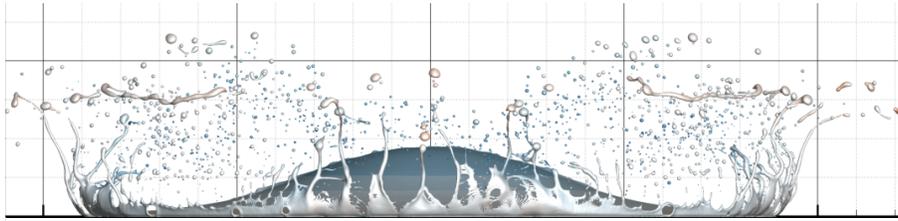


FIGURE 64 – Calcul réalisé hors campagne - $D = 302 \mu m$, $V = 33.6 m.s^{-1}$, $\rho_g = 12 kg.m^{-3}$ - $\Delta^* = 302$ - $t^* = 0.77$ - Une couronne est obtenue qui se destabilise en ligaments, produisant une myriade de gouttes secondaires.

L'enjeu de cette question est de premier plan car, comme cela a été analysé dans le contexte, les impacts en régime SLD dans le contexte aéronautique se produisent à des densités d'air plus faibles qu'au sol. Ainsi, la validité de modèles pour la description d'impact de gouttes établis au sol doit être éprouvée face à cet effet de variation de densité d'air.

5.2.3 Influence de l'angle d'impact sur le *splash*.

En vol, les impacts de gouttes ne se produisent pas nécessairement au niveau du point d'arrêt, où l'angle d'impact est de 90° . Des impacts à angle plus faibles, voire rasants peuvent se produire et il est intéressant d'en analyser le profil. De plus, l'étude menée expérimentalement à l'ONERA avait mis en évidence une forte dépendance du taux de dépôt avec l'angle d'impact (Figure 25).

L'objectif est ici d'étudier l'influence de l'angle d'impact sur le *splash*. On déclenche un *splash* en couronne en réalisant les calculs à $\rho_g = 12 kg.m^{-3}$ et on étudie ici 4 angles d'impacts : 10° , 20° , 45° et 90° . Les résultats de simulation pour ces angles sont proposés en Figure 65.

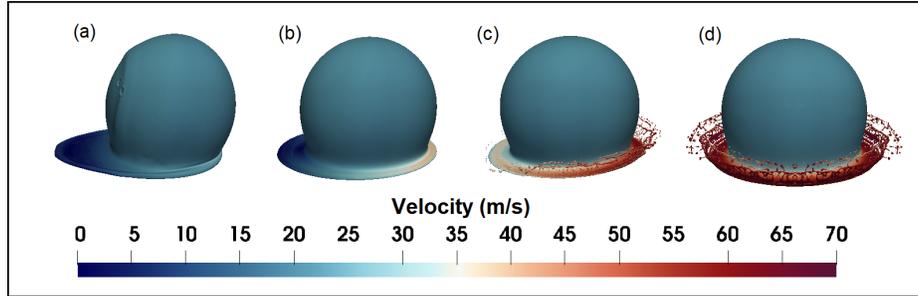


FIGURE 65 – Impacts à différents angles d’incidence α pour une même vitesse d’impact $\|\mathbf{V}\| = 20 \text{ m.s}^{-1}$. $\rho_g = 12 \text{ kg.m}^{-3}$, $D = 420 \text{ }\mu\text{m}$, $t_y^* = \frac{tV_y}{D} = 0.25$. (a) : $\alpha = 10^\circ$, (b) : $\alpha = 20^\circ$, (c) : $\alpha = 45^\circ$, (d) : $\alpha = 90^\circ$.

Sur cette Figure, on se place au même temps adimensionné basé sur la vitesse normale à la paroi V_y . Sur les angles rasants, le *splash* est supprimé et la vitesse de la lamelle liquide est notablement plus faible. En effet, le liquide constituant cette lamelle est issue de la redirection du liquide ayant une vitesse V_y à l’approche de la paroi. Ainsi, pendant un intervalle de temps Δt , le volume qui doit être “évacué” de la zone de contact (portion de la goutte passant virtuellement sous la paroi) est $\mathcal{V} = \frac{\pi \ell^2}{3}(3R - \ell)$ avec $\ell = (D - V_y \Delta t)$. Ainsi, sur un impact normal, la vitesse de la lamelle liquide à l’éjection sera, à épaisseur comparable, bien plus importante que dans le cas d’un impact rasant.

Sur la configuration (c) où $\alpha = 45^\circ$, la production de gouttes secondaires est plus élevée à l’avant qu’à l’arrière (Fig. 66) : en effet, la vitesse d’éjection de la lamelle se compose avec la vitesse de la goutte et le différentiel de vitesse entre avant et arrière est de 20 m.s^{-1} .

De l’analyse de ces simulations, il apparaît en réalité une vitesse limite de la lamelle liquide pour laquelle le *splash* se déclenche, d’environ 50 m.s^{-1} . Sur un impact normal, lorsque la couronne se fragmente de la lamelle liquide qui reste en paroi, la vitesse dans la lamelle est alors du même ordre. Cette observation est tout à fait en accord avec un critère de seuil basé sur un bilan local des efforts exercés sur la lamelle, comme proposé par le paramètre β de Riboux et al. [46] défini en Equation (6). On montre ici tout l’intérêt de cette vision locale pour la prédiction du *splash* en préférence à des modèles basés uniquement sur les caractéristiques de la goutte impactante.

Nous venons de montrer que plus l’angle d’incidence augmente, plus la production de gouttes secondaires est importante. A l’inverse, un faible angle d’incidence correspond à une masse éjectée par *splash* très faible voire nulle. Or, la mesure expérimentale du taux de dépôt (Figure 25) avait montré un comportement *a priori* contradictoire : aux faibles angles, peu de masse reste en paroi, et une part importante reste en paroi aux angles importants, avec un plafond du taux de dépôt à une valeur $\tau_{max} \sim 80\%$. L’explication que nous proposons

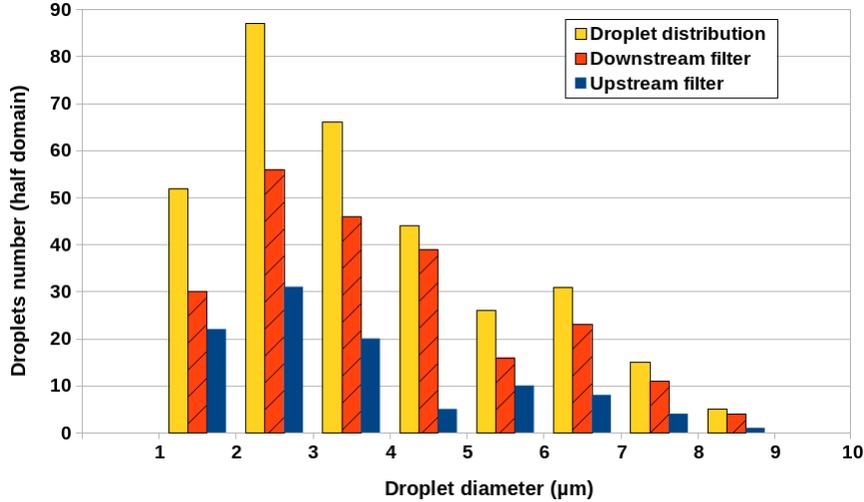


FIGURE 66 – Distribution obtenue sur une moitié de domaine pour un impact à $\alpha = 45^\circ$ - configuration (c) de la Figure 65. La distribution est décomposée en une partie amont en bleu (côté arrière de la goutte, à plus faible vitesse) et d’une partie aval en orange hachuré (côté avant à plus forte vitesse). Les gouttes secondaires sont majoritairement produites sur les zones à forte vitesse.

à cette apparente contradiction est que le *splash* n’est pas le phénomène qui dicte au premier ordre ce comportement du taux de dépôt, et on soupçonne plutôt les effets de rebonds ou de rebonds partiels de dicter ce comportement. En revanche, sur des impacts normaux, la perte de masse due au splash peut expliquer le plafonnement du taux de dépôt à une valeur inférieure à 100%.

5.3 Bilan du chapitre.

Dans ce chapitre, nous avons procédé au dépouillement et à l’analyse des essais expérimentaux pour choisir une configuration de calcul qui soit à la fois pertinente et réalisable pour l’étude de l’impact à haute vitesse. Une campagne de calcul a été réalisée dont le dépouillement et l’analyse est en cours.

Nous avons montré la sensibilité de la topologie obtenue en démontrant que l’ajout d’un film liquide même sub-micronique peut déclencher un *splash* en couronne. A l’inverse, l’angle de contact n’a aucune incidence mesurable sur le phénomène. L’effet de rugosité est soupçonné important mais n’a pas été étudié.

Par le calcul, nous avons également montré qu’il était possible de déclencher un *splash* en couronne en augmentant la densité de l’air. A l’inverse, une suppression du *splash* est obtenue en simulant des impacts avec un angle rasant. Ce comportement démontre que le *splash* n’est pas de premier ordre dans la variation du taux de dépôt avec l’angle d’incidence, mais peut expliquer une perte de masse non négligeable sur les cas d’impacts normaux. On a montré

enfin la pertinence d'une vision locale sur la lamelle liquide pour la construction de modèles prédictifs.

Nous n'avons ici analysé que partiellement la base de données qui a été constituée par la campagne de calcul. En particulier, nous n'avons pas traité ici de la configuration C3 destinée aux phénomènes "aux temps longs" tels que la dynamique d'étalement ou de rebond. De premiers résultats proposés en Figure 67 montrent une dépendance forte de la surface d'étalement à l'angle d'incidence. Ces résultats peuvent avoir des implications importantes, car si la forme d'étalement est très différente, on s'attend également à un comportement différent pour un rebond éventuel. De plus, dans un contexte SLD, avec une prise en compte du changement de phase, on soupçonne que la forme d'étalement peut directement piloter la quantité et la forme de la glace déposée lors de l'impact.

On reviendra sur les perspectives dégagées par ces premiers résultats dans la partie consacrées à la discussion à la suite de ce chapitre.

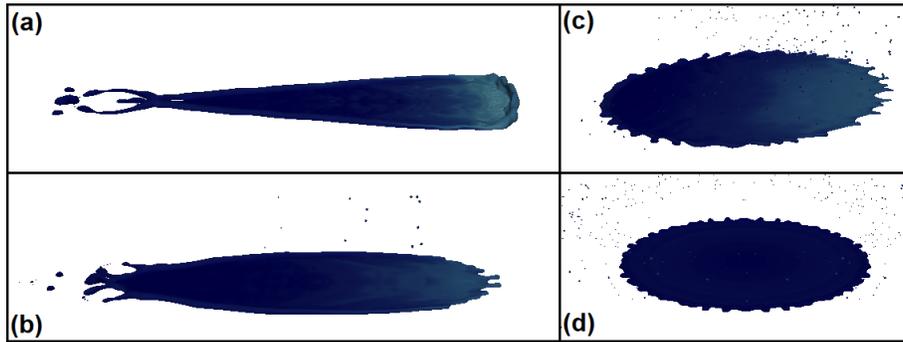


FIGURE 67 – Premiers traitements des calculs en configuration C3 - Effet de l'angle d'incidence sur la forme d'étalement à l'étalement maximum. (a) : $\alpha = 10^\circ$, (b) : $\alpha = 20^\circ$, (c) : $\alpha = 45^\circ$, (d) : $\alpha = 90^\circ$. $\Delta^* = 117$. Des instabilités apparaissent pendant l'étalement (formation de doigts ou dents de scie). De façon surprenante, on capte également l'émission de certaines gouttes secondaires en début d'impact.

Conclusion de l'étude, discussion et perspectives.

Bilan des travaux réalisés.

Cette étude était portée par le besoin d'une meilleure compréhension du phénomène d'impact de goutte dans le contexte SLD pour la lutte contre le givrage en vol. Dans ce cadre, une première partie de ce travail a consisté à réaliser un état et une analyse de la bibliographie. En premier lieu, nous avons ainsi pu préciser le cadre des impacts SLD en définissant des plages de valeurs pour les paramètres d'impact et le milieu environnant. Ce travail a notamment abouti à la construction d'un diagramme en nombre adimensionnel délimitant le domaine SLD. L'étude bibliographique a pointé le manque de travaux dans ces régimes, l'essentiel de la bibliographie se concentrant plutôt sur des impacts à la vitesse de quelques mètres par seconde pour des gouttes millimétriques. Les travaux menés à l'ONERA ont également soulevé des questions sur les mécanismes physiques d'impact, en particulier suite aux mesures réalisées pour le taux de dépôt.

Dans le code numérique DYJEAT, nous avons choisi et implémenté un modèle d'angle de contact statique et dynamique permettant la prise en compte des effets capillaires en paroi. Un cas d'impact en configuration d'étalement a été étudié et a montré la validité de l'implémentation. De plus, on montre l'importance du choix de la loi d'angle de contact sur ce type de configuration, pouvant conduire à une topologie de rebond ou d'étalement.

Le cas d'un *splash* en couronne a été abordé et montre la capacité du code existant à simuler l'atomisation secondaire lors d'un impact sur film. Plus précisément, on montre que les méthodes robustes et consistantes mises en place ces dernières années sont nécessaires pour reproduire de façon précise l'élévation de la couronne et la production de gouttes secondaires. Si la formation de couronne peut alors être captée avec un maillage relativement grossier (quelques dizaines de mailles dans le diamètre initial), la simulation des instabilités requiert plus de ressources de calcul. On propose également dans ce travail une caractérisation fine de l'élévation de couronne, en insistant sur la criticité d'une définition précise des points de mesure lors de la publication de résultats. L'extraction de résultats à partir des simulations 3D permettent l'obtention de données riches et originales, comme le profil d'épaisseur au cours du temps, difficilement accessibles par l'expérience.

Nous nous sommes ensuite intéressés à des impacts à haute vitesse. Dans un premier temps, des résultats d'essais menés à l'ONERA ont été dépouillés grâce au développement d'un script de traitement d'images. L'analyse des impacts montre un comportement similaire pour des cas d'impacts à vitesse modérée ($\sim 20 \text{ m/s}$) par rapport à des impacts à plus forte vitesse ($\sim 60 \text{ m.s}^{-1}$) avec l'obtention d'une couronne très instable. A partir de ces traitements, nous avons dimensionné et réalisé une campagne de calculs à forte

demande en ressources ($\sim 30 \text{ Mh.cpu}$) pour étudier l’initiation du *splash* d’une part et l’étalement d’autre part. Les résultats présentés ici se focalisent sur le premier point, le reste des simulations étant toujours en cours d’analyse. L’effet de plusieurs paramètres a été caractérisé. On montre que l’ajout d’un film très fin déclenche l’apparition d’une couronne liquide même si l’épaisseur de celui-ci est sub-micronique. L’augmentation de la densité de l’air permet également de déclencher ce type de *splash* malgré l’absence de prise en compte dans le code des effets relevant de la mécanique des milieux non-continus mis en évidence dans la littérature. Le déclenchement du *splash* s’est montré indépendant de la mouillabilité dû au caractère très inertiel du début de la phase d’étalement. Enfin des calculs d’impacts obliques ont mis en évidence la suppression du *splash*, même à forte vitesse, et l’existence d’une vitesse limite de la lamelle pour l’apparition de gouttes secondaires.

Pour alléger le coût de ces calculs, un travail d’optimisation a été mené sur le code permettant un gain de l’ordre de 15% en restreignant notamment le transport des variables décrivant l’interface dans une bande autour de celle-ci. Une étude approfondie a également été menée pour une caractérisation fine du comportement de la méthode numérique employée. Cette analyse d’un cas de goutte statique a mis en avant la criticité du choix de l’interpolation pour la courbure dans le cadre d’une méthode Ghost-Fluid pour la génération de courants parasites

Discussion et perspectives.

L’étude réalisée ici ouvre de nombreuses perspectives.

Un apport majeur de cette thèse a été l’instrumentation du code de calcul pour pouvoir extraire avec plus de facilité des données issues de simulation 3D, même si celles-ci dépassent le milliard de points. Sur le cas de Cossali et al. [65], nous avons ainsi pu caractériser finement la couronne liquide. Il s’agirait à présent d’aller au-delà de la caractérisation et de confronter ces résultats aux modèles théoriques disponibles en littérature, en ciblant notamment le modèle de Riboux et al. [46] capable de prédire plusieurs grandeurs de couronne comme la position, l’épaisseur ou la vitesse d’ascension.

Sur ce même cas, il serait intéressant de réaliser une étude centrée sur la production des gouttes secondaires. En particulier, le suivi d’un ligament depuis sa formation en extrémité de couronne jusqu’à sa destabilisation en goutte(s) peut amener des données pour la modélisation. L’instrumentation se poursuit actuellement pour doter le code de la capacité de suivre des structures liquides au cours de leur évolution dans la simulation. Ce *tracking* pourrait permettre d’apporter un nouvel éclairage dans les mécanismes de générations d’instabilités. Une corrélation du diamètre des gouttes éjectées à l’épaisseur en haut de couronne, qui n’avait pas pu être réalisée par Cossali, pourrait être un apport intéressant.

Sur les impacts à haute vitesse, nous avons mis en évidence la sensibilité à la nature de la cible. L'un des points sensibles est la rugosité de la paroi et n'a pas été exploré par le calcul. Sur la configuration d'étude, l'amplitude des rugosités mesurée est supérieure à la taille de la maille utilisée en configuration C1. Aussi, le code intégrant déjà des méthodes d'interfaces immergées, il serait possible de réaliser une étude sur l'influence des rugosités (en étudiant divers motifs) sur la nature de l'impact en maillant les rugosités. Il n'est pas impossible que la présence de celles-ci soit suffisante pour expliquer la différence entre la simulation obtenue et l'expérience.

Si nous avons montré qu'au niveau expérimental, un meilleur contrôle de l'état de paroi était indispensable, rien ne garantit néanmoins que le code puisse simuler des impacts en couronne sur paroi sèche. Nous nous sommes ainsi intéressés brièvement à la simulation d'un impact en couronne proposé par Xu et al [39], pour lequel la paroi est sèche (changée à chaque impact) et lisse (rugosité de quelques dizaines de nm). L'effet de la résolution a été exploré sur des simulations 2D jusqu'à des $\Delta^* = 512$ sans jamais obtenir de couronne liquide. Des comparaisons avec le code DIVA de l'IMFT, ainsi qu'un code compressible SLOSH développé à l'ONERA n'ont pas donné de résultats plus probants. Le non-résultat de cette étude préliminaire tend à montrer que sur une paroi parfaitement lisse, la prise en compte d'effets relevant de la mécanique des milieux non continus est bien nécessaire pour obtenir un décollement de la lamelle liquide.

Il reste que le code peut bien produire un *prompt splash* sur paroi sèche. Si nous avons vu qu'une convergence en maillage était difficile à obtenir sur les distributions de gouttes secondaires, nous n'avons pour l'heure pas pu évaluer la qualité des résultats obtenus, du fait des incertitudes importantes sur les distributions établies dans les expériences. En revanche, les récents travaux proposés par Burzynski et al. [28] proposent des résultats d'impacts sous différents environnements gazeux en exploitant précisément les caractéristiques des gouttes secondaires. Une collaboration a donc été lancée en fin de thèse pour une étude numérique sur ces configurations. Pour des impacts sur films, il semble en revanche que le modèle physique utilisé puisse être suffisant pour décrire le comportement de l'impact, et le code peut-être utilisé pour décrire de telles configurations.

De façon évidente, la poursuite de l'analyse de la campagne de calculs entre dans les perspectives. En particulier, les analyses de gouttes secondaires et de la forme d'étalement sont à réaliser. On s'intéressera notamment à l'influence de la loi d'angle de contact sur cet étalement et à l'angle d'impact. Côté expérimental, l'ONERA a démarré en 2019 la construction d'une soufflerie givrante afin d'étudier des impacts en condition SLD (haute vitesse, état surfondu), avec une thèse de doctorat associée à cette étude. Les données de ces expériences pourront servir de référence pour de futurs calculs. Il s'agira alors d'implémenter au sein du code DYJEAT la résolution de l'équation de l'énergie et le changement de phase. Pour ce dernier point, les méthodes d'interfaces immergées déjà présentes dans le code peuvent être une solution technique envisageable.

Il reste à évoquer les développements numériques identifiés comme perspectives de travail. En dehors de la poursuite des analyses initiées au Chapitre 3, les méthodes numériques disponibles actuellement sont jugées suffisantes par leur robustesse et leur précision, pour explorer la plupart des perspectives générées plus haut. Notons néanmoins que le développement d'une version axisymétrique du code pourrait être un outil puissant pour l'analyse. Des travaux supplémentaires sur l'optimisation des performances peuvent également être envisagés : utilisation d'accélérateurs (GPU), hybridation MPI-OpenMP, vectorisation SIMD, adaptation de maillage performante, masquage des communications ...

Références

- [1] DGAC, “Rapport du symposium de 2008 sur le givrage des aéronefs,” tech. rep., 2008.
- [2] BEA, “Bulletin sécurité pour la dsac,” Tech. Rep. 23, 2015.
- [3] BEA, “Rapport final sur l’accident de l’avion dc-9-83,” tech. rep., 2016.
- [4] EASA, “Norme cs25 relative aux gros avions, 18ème amendement,” tech. rep., Juin 2016.
- [5] F. MCDONOUGH, C. A WOLFF, and M. K POLITOVICH, “Forecasting supercooled large drop conditions,” *13th Conference on Aviation, Range and Aerospace Meteorology*, 07 2015.
- [6] S. G. BENJAMIN, G. A. GRELL, J. M. BROWN, T. G. SMIRNOVA, and R. BLECK, “Mesoscale weather prediction with the ruc hybrid isentropic–terrain-following coordinate model,” *Monthly Weather Review*, vol. 132, no. 2, pp. 473–494, 2004.
- [7] G. J. HUFFMAN and G. A. NORMAN, “The supercooled warm rain process and the specification of freezing precipitation,” *Monthly Weather Review*, vol. 116, no. 11, pp. 2172–2182, 1988.
- [8] I. GERESDI and R. RASMUSSEN, “Freezing drizzle formation in stably stratified layer clouds. part ii : The role of giant nuclei and aerosol particle size distribution and solubility,” *Journal of The Atmospheric Sciences - J ATMOS SCI*, vol. 62, pp. 2037–2057, 07 2005.
- [9] B. C. BERNSTEIN, T. P. RATVASKY, D. R. MILLER, and F. MCDONOUGH, “Freezing rain as an in-flight icing hazard,” *NTRS*, 07 2000.
- [10] S. G. COBER, G. A. ISAAC, and J. W. STRAPP, “Aircraft icing measurements in east coast winter storms,” *Journal of Applied Meteorology*, vol. 34, no. 1, pp. 88–100, 1995.
- [11] S. G. COBER and G. A. ISAAC, “Characterization of aircraft icing environments with supercooled large drops for application to commercial aircraft certification,” *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, vol. 51, no. 2, pp. 265–284, 2012.
- [12] V. HOLTEN and M. ANISIMOV, “Entropy-driven liquid–liquid separation in supercooled water,” *Scientific reports*, vol. 2, p. 713, 10 2012.
- [13] A. DEHAOUI, *Viscosity of supercooled water*. Theses, Université Claude Bernard - Lyon I, Oct. 2015.
- [14] J. HRUBY, V. VINS, R. MARES, J. HYKL, and J. KALOVA, “Surface tension of supercooled water : No inflection point down to $-25\text{ }^{\circ}\text{c}$,” *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 5, p. 425–428, 01 2014.
- [15] J. L. PEREZ-DIAZ, M. ALVAREZ-VALENZUELA, and J. GARCIA-PRADA, “The effect of the partial pressure of water vapor on the surface tension of the liquid water–air interface,” *Journal of colloid and interface science*, vol. 381, pp. 180–2, 05 2012.

- [16] E. COUSTOLS, “Effet des parois rainurées (*riblets*) sur la structure d’une couche limite turbulente,” *Mécanique & Industries*, vol. 2, no. 5, pp. 421 – 434, 2001.
- [17] H. KORDY, “Process abilities of the riblet-coating process with dual-cure lacquers,” *CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology*, vol. 11, pp. 1 – 9, 2015.
- [18] S. T. MCCLAIN, M. VARGAS, J.-C. TSAO, A. P. BROEREN, and S. LEE, “Ice accretion roughness measurements and modeling,” in *7th European conference for aeronautics and space sciences (EUCASS)*, 2017.
- [19] Y.-E. KANG, S. MIN, T. KIM, and K. YEE, “Experimental investigation on bead growth and dispersion under low-speed icing condition,” in *International Workshop on Atmospheric Icing of Structures*, 2019.
- [20] K. ZHANG, T. WEI, and H. HU, “An experimental investigation on the surface water transport process over an airfoil by using a digital image projection technique,” *Experiments in Fluids*, vol. 56, p. 173, Aug 2015.
- [21] A. M. WORTHINGTON, “On the forms assumed by drops of liquids falling vertically on a horizontal plate,” *Proceedings of the Royal Society*, pp. 261–271, 1876.
- [22] A. M. WORTHINGTON, *A study of Splashes*. Longmans, Green, and Co., 1908.
- [23] C. JOSSERAND and S. THORODDSEN, “Drop impact on a solid surface,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 48, no. 1, pp. 365–391, 2016.
- [24] R. RIOBOO, M. MARENGO, and C. TROPEA, “Outcomes from a drop impact on solid surfaces,” *ATOMIZATION AND SPRAYS*, vol. 11, pp. 155–166, 03 2001.
- [25] E. Q. LI and S. T. THORODDSEN, “Time-resolved imaging of a compressible air disc under a drop impacting on a solid surface,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 780, p. 636–648, 2015.
- [26] S. MANDRE, M. MANI, and B. MICHAEL P., “Precursors to splashing of liquid droplets on a solid surface,” *Physical Review Letters*, vol. 102, 3 2009.
- [27] S. MANDRE and M. P. BRENNER, “The mechanism of a splash on a dry solid surface,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 690, p. 148–172, 2012.
- [28] D. A. BURZYNSKI and S. E. BANSMER, “Role of surrounding gas in the outcome of droplet splashing,” *Phys. Rev. Fluids*, vol. 4, p. 073601, Jul 2019.
- [29] Y. LIU, P. TAN, and L. XU, “Compressible air entrapment in high-speed drop impacts on solid surfaces,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 716, p. R9, 2013.
- [30] Y. LIU, P. TAN, and L. XU, “Kelvin-helmholtz instability in an ultrathin air film causes drop splashing on smooth surfaces,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 112, no. 11, pp. 3280–3284, 2015.

- [31] N. LAAN, K. G. DE BRUIN, D. BARTOLO, C. JOSSERAND, and D. BONN, “Maximum diameter of impacting liquid droplets,” *Phys. Rev. Applied*, vol. 2, p. 044018, Oct 2014.
- [32] B. L. SCHELLER and D. BOUSFIELD, “Newtonian drop impact with solid surface,” *AIChE Journal*, vol. 41, pp. 1357 – 1367, 06 1995.
- [33] M. PASANDIDEH-FARD, Y. M. QIAO, S. CHANDRA, and J. MOSTAGHIMI, “Capillary effects during droplet impact on a solid surface,” *Physics of Fluids*, vol. 8, no. 3, pp. 650–659, 1996.
- [34] C. UKIWE and D. Y. KWOK, “On the maximum spreading diameter of impacting droplets on well-prepared solid surfaces,” *Langmuir*, vol. 21, no. 2, pp. 666–673, 2005.
- [35] C. CLANET, C. BÉGUIN, D. RICHARD, and D. QUÉRÉ, “Maximal deformation of an impacting drop,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 517, p. 199–208, 2004.
- [36] I. V. ROISMAN, “Inertia dominated drop collisions. ii. an analytical solution of the navier–stokes equations for a spreading viscous film,” *Physics of Fluids*, vol. 21, no. 5, p. 052104, 2009.
- [37] J. EGGERS, M. A. FONTELOS, C. JOSSERAND, and S. ZALESKI, “Drop dynamics after impact on a solid wall : Theory and simulations,” *Physics of Fluids*, vol. 22, no. 6, p. 062101, 2010.
- [38] S. T. THORODDSEN, K. TAKEHARA, and T. G. ETOH, “Microsplashing by drop impacts,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 706, p. 560–570, 2012.
- [39] L. XU, W. ZHANG, and S. R. NAGEL, “Drop splashing on a dry smooth surface,” *Physical review letters*, vol. 94, p. 184505, 06 2005.
- [40] I. BISCHOFBERGER, K. W. MAUSER, and S. R. NAGEL, “Seeing the invisible—air vortices around a splashing drop,” *Physics of Fluids*, vol. 25, no. 9, p. 091110, 2013.
- [41] P. G. DE GENNES, “On fluid/wall slippage,” *Langmuir*, vol. 18, no. 9, pp. 3413–3414, 2002.
- [42] S. T. THORODDSEN, K. TAKEHARA, and T. G. ETOH, “Bubble entrapment through topological change,” *Physics of Fluids*, vol. 22, no. 5, p. 051701, 2010.
- [43] J. HAO, “Effect of surface roughness on droplet splashing,” *Physics of Fluids*, vol. 29, no. 12, p. 122105, 2017.
- [44] C. D. STOW and M. G. HADFIELD, “An experimental investigation of fluid flow resulting from the impact of a water drop with an unyielding dry surface,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 373, no. 1755, pp. 419–441, 1981.
- [45] C. MUNDO, M. SOMMERFELD, and C. TROPEA, “Droplet-wall collisions : Experimental studies of the deformation and breakup process,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 21, no. 2, pp. 151 – 173, 1995.

- [46] G. RIBOUX and J. M. GORDILLO, “Experiments of drops impacting a smooth solid surface : A model of the critical impact speed for drop splashing,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, Jul 2014.
- [47] G. RIBOUX and J. M. GORDILLO, “The diameters and velocities of the droplets ejected after splashing,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 772, p. 630–648, 2015.
- [48] J. HAO and S. I. GREEN, “Splash threshold of a droplet impacting a moving substrate,” *Physics of Fluids*, vol. 29, no. 1, p. 012103, 2017.
- [49] K. YOKOI, D. VADILLO, J. HINCH, and I. HUTCHINGS, “Numerical studies of the influence of the dynamic contact angle on a droplet impacting on a dry surface,” *Physics of Fluids*, vol. 21, no. 7, p. 072102, 2009.
- [50] M. LEGENDRE, D. and MAGLIO, “Comparison between numerical models for the simulation of moving contact lines,” *Computers & Fluids*, vol. 113, pp. 2 – 13, 2015. Small scale simulation of multiphase flows.
- [51] Z. JIAN, C. JOSSERAND, S. POPINET, P. RAY, and S. ZALESKI, “Two mechanisms of droplet splashing on a solid substrate,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 835, p. 1065–1086, 2018.
- [52] Y. GUO, Y. LIAN, and M. SUSSMAN, “Investigation of drop impact on dry and wet surfaces with consideration of surrounding air,” *Physics of Fluids*, vol. 28, no. 7, p. 073303, 2016.
- [53] R. CIMPEANU and D. T. PAPAGEORGIOU, “Three-dimensional high speed drop impact onto solid surfaces at arbitrary angles,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 107, pp. 192 – 207, 2018.
- [54] T. XAVIER, D. ZUZIO, M. AVERSENG, and J.-L. ESTIVALEZES, “Toward direct numerical simulation of high speed droplet impact,” *Meccanica*, May 2019.
- [55] G. LIANG and I. MUDAWAR, “Review of mass and momentum interactions during drop impact on a liquid film.,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 101, no. C, pp. 577–599, 2016.
- [56] C. TROPEA and M. MARENCO, “The impact of drops on walls and films,” *Multiphase Science and Technology*, vol. 11, no. 1, pp. 19–36, 1999.
- [57] R. L. VANDER WAL, G. M. BERGER, and S. D. MOZES, “Droplets splashing upon films of the same fluid of various depths,” *Experiments in Fluids*, vol. 40, pp. 33–52, Jan 2006.
- [58] A.-B. WANG and C.-C. CHEN, “Splashing impact of a single drop onto very thin liquid films,” *Physics of Fluids*, vol. 12, no. 9, pp. 2155–2158, 2000.
- [59] R. D. DEEGAN, P. BRUNET, and J. EGGERS, “Complexities of splashing,” *Nonlinearity*, vol. 21, pp. C1–C11, dec 2007.
- [60] H. EDGERTON and J. KILLIAN, *Flash! : Seeing the Unseen by Ultra High-speed Photography*. C.T. Branford Co., Boston, 1954.

- [61] A. L. YARIN and D. A. WEISS, “Impact of drops on solid surfaces : self-similar capillary waves, and splashing as a new type of kinematic discontinuity,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 283, p. 141–173, 1995.
- [62] M. TRUJILLO and C. LEE, “Modeling crown formation due to the splashing of a droplet,” *Physics of Fluids*, vol. 13, 09 2001.
- [63] I. V. ROISMAN and C. TROPEA, “Impact of a drop onto a wetted wall : description of crown formation and propagation,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 472, p. 373–397, 2002.
- [64] A. FEDORCHENKO and A.-B. WANG, “On some common features of drop impact on liquid surfaces,” *Physics of Fluids - PHYS FLUIDS*, vol. 16, 05 2004.
- [65] G. COSSALI, M. MARENGO, A. COGHE, and S. ZHDANOV, “The role of time in single drop splash on thin film,” *Experiments in Fluids*, vol. 36, pp. 888–900, 06 2004.
- [66] A. SOCHAN, M. BECZEK, R. MAZUR, M. RYZAK, and A. BIEGANOWSKI, “The shape and dynamics of the generation of the splash forms in single-phase systems after drop hitting,” *Physics of Fluids*, vol. 30, no. 2, p. 027103, 2018.
- [67] G. LIANG, G. YA-LI, and S. SHEN, “Analysis of liquid sheet and jet flow mechanism after droplet impinging onto liquid film,” *Acta Physica Sinica -Chinese Edition-*, vol. 62, p. 024705, 02 2013.
- [68] C. JOSSERAND and S. ZALESKI, “Droplet splashing on a thin liquid film,” *Physics of Fluids*, vol. 15, no. 6, pp. 1650–1657, 2003.
- [69] L. V. ZHANG, J. L. TOOLE, K. FEZZAA, and R. D. DEEGAN, “Evolution of the ejecta sheet from the impact of a drop with a deep pool,” 2012.
- [70] S. THORODDSEN, “The ejecta sheet generated by the impact of a drop,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 451, pp. 373 – 381, 01 2002.
- [71] F. MARCOTTE, G.-J. MICHON, T. SÉON, and C. JOSSERAND, “Ejecta, corolla, and splashes from drop impacts on viscous fluids,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 122, p. 014501, Jan 2019.
- [72] G. AGBAGLAH, C. JOSSERAND, and S. ZALESKI, “Longitudinal instability of a liquid rim,” *Physics of Fluids*, vol. 25, no. 2, p. 022103, 2013.
- [73] R. KRECHETNIKOV and G. M. HOMSY, “Crown-forming instability phenomena in the drop splash problem,” *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 331, no. 2, pp. 555 – 559, 2009.
- [74] T. OKAWA, T. SHIRAIISHI, and T. MORI, “Production of secondary drops during the single water drop impact onto a plane water surface,” *Experiments in Fluids*, vol. 41, pp. 965–974, 11 2006.
- [75] X. CUI, A. BAKKAR, and W. GEORGE HABASHI, “A multiphase sph framework for supercooled large droplets dynamics,” *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 01 2019.

- [76] Y. GUO and Y. LIAN, “High-speed oblique drop impact on thin liquid films,” *Physics of Fluids*, vol. 29, no. 8, p. 082108, 2017.
- [77] M.-J. THORAVALL, *Drop impact splashing and air entrapment*. PhD thesis, 01 2013.
- [78] M. PAPADAKIS, A. NOOR RACHMAN, S. C. WONG, H. WEI YEONG, K. E. HUNG, G. T. VU, and C. S. BIDWELL, “Water droplet impingement on simulated glaze, mixed, and rime ice accretions,” 2007.
- [79] P. TRONTIN and P. VILLEDIEU, “Revisited model for supercooled large droplet impact onto a solid surface,” *Journal of Aircraft*, vol. 54, no. 3, pp. 1189–1204, 2017.
- [80] P. BERTHOUMIEU and B. DEJEAN, “Experimental investigation of sld impact phenomena,” in *7th European conference for aeronautics and space sciences (EUCASS)*, 2017.
- [81] K. RAMAN, R. JAIMAN, T.-S. LEE, and H.-T. LOW, “On the dynamics of crown structure in simultaneous two droplets impact onto stationary and moving liquid film,” *Computers & Fluids*, vol. 107, pp. 285–300, 01 2015.
- [82] G. LIANG, T. ZHANG, H. CHEN, H. YU, and S. SHEN, “Successive impact of multiple droplets on liquid film,” *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, vol. 74, pp. 389 – 398, 2019.
- [83] C. MING and L. JING, “Lattice boltzmann simulation of a drop impact on a moving wall with a liquid film,” *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 67, no. 2, pp. 307 – 317, 2014. Mesoscopic Methods for Engineering and Science (Proceedings of ICMMES-2012, Taipei, Taiwan, 23–27 July 2012).
- [84] G. LIANG, T. ZHANG, Y. CHEN, L. CHEN, and S. SHEN, “Two-phase heat transfer of multi-droplet impact on liquid film,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 139, pp. 832 – 847, 2019.
- [85] V. THIEVENAZ, T. SEON, and C. JOSSERAND, “Solidification dynamics of an impacted drop,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 874, p. 756–773, 2019.
- [86] V. THIEVENAZ, T. SEON, and C. JOSSERAND, “Freezing drop impact,” *71th Annual meeting of the APS division of Fluid Dynamics*, 2018 (URL accessible le 23/07/2019).
- [87] A. B. ALJEDAANI, C. WANG, A. JETLY, and S. T. THORODDSEN, “Experiments on the breakup of drop-impact crowns by marangoni holes,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 844, p. 162–186, 2018.
- [88] F. COUDERC, *Développement d’un code de calcul pour la simulation d’écoulements de fluides non miscibles : application à la désintégration assistée d’un jet liquide par un courant gazeux*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de l’Aéronautique et de l’Espace, 2007.

- [89] D.ZUZIO, *Direct numerical simulation of two phase flows with adaptive mesh refinement*. PhD thesis, Ecole nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace, 2010.
- [90] A.ORAZZO, I.LAGRANGE, J.-L. ESTIVALEZES, and D.ZUZIO, "A vof-based consistent mass-momentum transport for two-phase flow simulations," in *ASME Fluids Engineering Division summer meeting*, 2017.
- [91] I.MARTER, *Méthode d'interface immergée pour la simulation directe de l'atomisation primaire*. PhD thesis, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE), 2017.
- [92] A.CHORIN, "Numerical solution of navier-stokes equations.," *Mathematics of computation*, vol. 22, pp. 745–762, 1968.
- [93] R.TEMAM, "Sur l'approximation de la solution des équations de navier-stokes par la méthode des pas fractionnaires.," *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, vol. 221, pp. 837–853, 2007.
- [94] CW.SHU, "Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws.," tech. rep., ICASE-NASA, 1997.
- [95] E.WEINAN and L.JIAN-GUO, "Projection method i : Convergence and numerical boundary layers," *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 32, pp. 1017–1057, 1994.
- [96] K. LUO, C. SHAO, M. CHAI, and J. FAN, "Level set method for atomization and evaporation simulations," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 73, pp. 65 – 94, 2019.
- [97] S. OSHER and J. STHIAN, "Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on hamilton-jacobi formulations.," *Journal of Computational Physics.*, vol. 79, 1988.
- [98] R. DEBAR, "Fundamentals of the kraken code, report num. ucir-760, lawrence livermore laboratory," tech. rep., 1974.
- [99] M.SUSSMAN and E.PUCKETT, "A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows.," *Journal of computational physics.*, vol. 162, pp. 301–307, 2000.
- [100] T. MENARD, S. TANGUY, and A. BERLEMONT, "Coupling level set/vof/ghost fluid methods : Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet," *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 33, no. 5, pp. 510 – 524, 2007.
- [101] G.STRANG, "On the construction and comparison of difference schemes.," *SIAM Journal on numerical analysis*, vol. 5,num.3, pp. 506–517, Sep.1968.
- [102] M.GRIEBEL and M.KLITZ, "Clsvof as a fast and mass-conserving extension of the level-set method for the simulation of two-phase flow problems.," *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, vol. 71(1), pp. 1–36, 2017.

- [103] D.YOUNGS, “Numerical methods for fluid dynamics,” *Academic Press*, vol. 01, 1982.
- [104] T.MENARD, *Développement d’une méthode Level Set pour le suivi d’interface. Application de la rupture de jet liquide*. PhD thesis, 2007.
- [105] J.LOPEZ and J.HERNANDEZ, “Analytical and geometrical tools for 3d volume of fluid methods in general grids,” *Journal of Computational Physics*, vol. 227, pp. 5939–5948, 2008.
- [106] D. Q. NGUYEN, R. P. FEDKIW, and M. KANG, “A boundary condition capturing method for incompressible flame discontinuities,” *J. Comput. Phys*, vol. 172, pp. 71–98, 2000.
- [107] M.SUSSMAN, K.M.SMITH, M.Y.HUSSAINI, M.OHTA, and R.ZHIWHEI, “A sharp interface method for incompressible two-phase flows.,” *Journal of computational physics.*, vol. 221, no. 2, pp. 469–505, 2007.
- [108] F. XIAO, *Large Eddy Simulation of Liquid Jet Primary Breakup*. PhD thesis, Loughborough Univ., 2012.
- [109] M.RUDMAN, “A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations,” *International Journal for numerical methods in fluids*, vol. 28, pp. 357–378, 08 1998.
- [110] M. RAESSI and H. PITSCHE, “Consistent mass and momentum transport for simulating incompressible interfacial flows with large density ratios using the level set method,” *Computers & Fluids*, vol. 63, p. 70–81, 06 2012.
- [111] S. GHODS and M. HERRMANN, “A consistent rescaled momentum transport method for simulating large density ratio incompressible multiphase flows using level set methods,” *Physica Scripta*, vol. T155, p. 014050, jul 2013.
- [112] M. OWKES and O. DESJARDINS, “A mass and momentum conserving unsplit semi-lagrangian framework for simulating multiphase flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. 332, pp. 21 – 46, 2017.
- [113] G.VAUDOR, T.MENARD, W.ANISZEWSKI, M.DORING, and A.BERLEMONT, “A consistent mass and momentum flux computation method for two phase flows. application to atomization process.,” *Computers and Fluids*, vol. 152, 04 2017.
- [114] D. ZUZIO, A. ORAZZO, and J. ESTIVALEZES, “A new efficient momentum preserving level-set/vof method for high density and momentum ratio incompressible two-phase flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. under review.
- [115] P.ROE, “Some contributions to the numerical modelling of discontinuous flow,” *Lectures in Applied Mathematics*, vol. 22, 1985.
- [116] B.LALANNE, L. VILLEGAS, S.TANGUY, and F.RISSO, “On the computation of viscous terms for incompressible two-phase flows with level set/ghost fluid method.,” *Journal of Computational Physics*, vol. 301, pp. 289–307, 11 2015.

- [117] M.KANG, R.FEDWIK, and X.LIU, “A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow,” *Journal of scientific computing*, vol. 15, pp. 323–360, 09 2000.
- [118] F.GIBOU, R.P.FEDKIW, L. CHENG, and M.KANG, “A second-order-accurate symmetric discretization of the poisson equation on irregular domains,” *Journal of computational physics*, vol. 176, no. 1, pp. 205–227, 2002.
- [119] S.GOTTLIEB and C.-W. SHU, “Total variation diminishing runge-kutta schemes,” *Mathematics of Computation*, vol. 67, pp. 73–85, 01 1998.
- [120] J. RIGAUD and Z. Davide, “Rapport de stage de fin d’études (recherche).,” tech. rep., ONERA TOULOUSE, 2016.
- [121] D. HARTMANN, M. MEINKE, and W. SCHRODER, “The constrained reinitialization equation for level set methods,” *Journal of Computational Physics*, vol. 229, no. 5, pp. 1514 – 1535, 2010.
- [122] A. BENKENIDA, *Développement et validation d’une méthode de simulation d’écoulements diphasiques sans reconstruction d’interfaces : application à la dynamique des bulles de Taylor*. PhD thesis, 1999. Thèse de doctorat dirigée par Magnaudet, Jacques Mécanique des fluides Toulouse, INPT 1999.
- [123] S. XU and W. REN, “Reinitialization of the level-set function in 3d simulation of moving contact lines,” *Communications in Computational Physics*, vol. 20, no. 5, p. 1163–1182, 2016.
- [124] J. GUSTAFSON, “Reevaluating amdahl’s law,” *Commun. ACM*, vol. 31, pp. 532–533, 05 1988.
- [125] G. M. AMDAHL, “Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities,” in *Proceedings of the April 18-20, 1967, Spring Joint Computer Conference, AFIPS ’67 (Spring)*, (New York, NY, USA), pp. 483–485, ACM, 1967.
- [126] E. LEONARD, A. SOFIA GABRION, and T. XAVIER, “From physics to cinema : valorization of scientific results via realistic renderings - available upon request,” tech. rep., INSA TOULOUSE, 2019.
- [127] M. AVERSENG, D. ZUZIO, A. BOUTSIKAKIS, and J.-L. ESTIVALEZES, “Dns simulation and analysis of periodic planar liquid sheet assisted atomization.,” in *10th International Conference on Multiphase Flow (ICMF)*, 2019.
- [128] O. V. VOINOV, “Hydrodynamics of wetting,” *Fluid Dynamics*, vol. 11, pp. 714–721, Sep 1976.
- [129] R. G. COX, “The dynamics of the spreading of liquids on a solid surface. part 1. viscous flow,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 168, p. 169–194, 1986.
- [130] J. DUPAS, *Wetting of soluble polymers*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, Dec. 2012.

- [131] L. H. TANNER, “The spreading of silicone oil drops on horizontal surfaces,” *Journal of Physics D Applied Physics*, vol. 12, pp. 1473–1484, Sept. 1979.
- [132] T. BLAKE and J. HAYNES, “Kinetics of liquidliquid displacement,” *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 30, no. 3, pp. 421 – 423, 1969.
- [133] Y. D. SHIKHMURZAEV, “Moving contact lines in liquid/liquid/solid systems,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 334, p. 211–249, 1997.
- [134] T. D. BLAKE, “The physics of moving wetting lines,” *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 299, no. 1, pp. 1 – 13, 2006.
- [135] M. GRIEBEL and M. KLITZ, *Simulation of Droplet Impact with Dynamic Contact Angle Boundary Conditions*, pp. 297–325. Cham : Springer International Publishing, 2014.
- [136] M. SUSSMAN, *An Adaptive Mesh Algorithm for Free Surface Flows in General Geometries*. 04 2001.
- [137] Z. LEVIN, P. V. HOBBS, and G. I. TAYLOR, “Splashing of water drops on solid and wetted surfaces : hydrodynamics and charge separation,” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 269, no. 1200, pp. 555–585, 1971.

Annexe A - Article publié durant la thèse

Cette annexe propose la version acceptée après processus de révision (ou *postprint*) de l'article suivant : « Toward direct numerical simulation of high speed droplet impact » [54].

L'article a été publié dans le journal MECCANICA sous la référence suivante : *Xavier, T., Zuzio, D., Averseng, M. et al. Toward direct numerical simulation of high speed droplet impact. Meccanica 55, 387-401 (2020). <https://doi.org/10.1007/s11012-019-00980-x>*

La version acceptée est également accessible en archive ouverte dans HAL sous l'identifiant : *hal-02299033, version 1*.

Toward direct numerical simulation of high speed droplet impact.

T. Xavier · D. Zuzio · M. Averseng · J.-L. Estivalezes

Received: date / Accepted: date

Abstract When a liquid drop impacts a solid surface or a liquid film, several outcomes are possible. In particular, splashing phenomena can exhibit complex behaviors, like the formation of very thin crowns and emission of small droplets. Underlying mechanisms are hard to elucidate, partly due to the difficulty for current experimental devices to access to the very small length scales involved. Here, we use direct numerical simulation to explore low and high velocity drop impact phenomena. We show that classical incompressible two-phase methods can be sufficient to address low energy impacts and take into account wetting phenomena. However, dedicated robust and conservative methods are needed to simulate splashing phenomenon at higher velocities. In our test cases, we show that an impact on a thick liquid film exhibits thick crown formation and delayed splashing. On a dry wall, on the other hand, splashing phenomenon can be difficult to reproduce even with high velocity impacts. We show however how a higher value of the surrounding air density may trigger splashing. The presence of a even very thin liquid film on the wall strongly modifies impact outcome, forcing the ejection of a thin crown and subsequent secondary droplet emission.

Keywords Multiphase flow · Drop impact · Splashing phenomenon · Direct Numerical Simulation

1 Introduction

Drop impact phenomenon can be encountered in everyday situations. From the energetic raindrop splashing on the windshield to the gentle cascading from a leaf to another, this phenomenon has always attracted curiosity. Today various industrial applications as sprinkling irrigation, inkjet droplets, combustion or icing in aviation are interested in the deep understanding of drop impact phenomenon.

If the problem have been studied for more than a century [1], the last decades have seen a sharp rise of interest in this topic. On one hand, the improvement of temporal and spatial resolution of the visual acquisition devices enables the access to microscopic phenomena with an acquisition frequency able to reach over a million frames per second [2]. On the other hand, the development of new computational clusters and numerical methods allow the community to investigate fully 3D cases, and access to physical quantities hardly measurable by experimental means.

This active research resulted in a lot of progresses with still many open questions, especially about splash mechanism which could involve sub-micronic effects. For an updated state-of-the-art, the reader is strongly encouraged to read the insightful reviews proposed by Josserand and Thoroddsen [3] and Liang and Mudawar [4]. The outcome of a drop impact can be classified in three regimes, mainly depending on the impact velocity. A low energy impact leads to deposition or rebound of impacting droplets, driven by a competition between inertia and capillary forces. At higher energy,

T. Xavier
E-mail: thibault.xavier@onera.fr

D. Zuzio
Tel.: +33562252845 E-mail: davide.zuzio@onera.fr

M. Averseng
E-mail: matthias.averseng@onera.fr

J.L. Estivalezes
Tel.: +33562252832 E-mail: jean-luc.estivalezes@onera.fr

ONERA/DMPE - Université de Toulouse, F-31055, Toulouse, France

a liquid crown is formed, enhanced by the presence of a liquid film. This crown might be unstable : secondary droplets may be formed by jetting phenomena during crown ascend, which is designated as delayed splashing. Finally, high energy impacts lead to small liquid structures formation in the early stages of the impact (prompt splashing). Splashing might in this case result in a flow seeded with hundreds of secondary droplets, which can eventually impact the wall again.

It should be noticed that an overwhelming majority of works concerns the fall of millimeter-sized droplets under gravity, with a velocity between one to ten meters per second, but very few on high velocity and micrometric droplets. However, these high-energy regimes are involved in many key industrial applications such as in the aviation context. Moreover, scaling laws based on Reynolds and Weber number only are not sufficient to predict splashing phenomenon[5], which encourages works to be in the same dimensional configuration to perform comparisons with other papers.

In this study, we explore drop impact phenomenon by using fully three-dimensional direct numerical simulation, and show that highly precise and conservative methods are required to properly reproduce splashing phenomenon. In the first part, the code DYJEAT we used and numerical methods will be described. Then, a low energy impact on a solid surface will be presented as a validation case. In a third part, a delayed splashing case is tested and crown formation is studied. Finally a high-energy impact configuration is explored. A particular effort has been made to discuss the results obtained in exploratory configurations.

2 Problem Description

In the following, the impact of a single drop is considered. This drop of diameter D impacts a target with velocity U_D . This target is either a liquid film of thickness h_{film} or a solid surface assumed smooth and exempt from impurities. Density and dynamic viscosity are respectively designated by ρ_l and μ_l for the liquid phase, and by ρ_g and μ_g for the gas. Surface tension is noted σ . Once the drop contacts the solid surface, a triple line is formed, defined as the common frontier of the gas, the liquid and the solid phase. This contact line moves with velocity U_{CL} . Dimensionless numbers can be constructed using these parameters, such as the Reynolds, Weber and Capillary number or the adimensional film thickness.

$$Re_l = \frac{\rho_l U_D D}{\mu_l} \quad We = \frac{\rho_l U_D^2 D}{\sigma}$$

$$Ca = \frac{\mu_l U_{CL}}{\sigma} \quad h^* = \frac{h_{film}}{D}$$

Each fluid phase is considered as incompressible. Mass conservation (1) under the incompressible assumption, is equivalent to a divergence free velocity vector (2):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (2)$$

where \mathbf{U} is the velocity vector, t is the time, ρ the density. Momentum equation can be written under conservative form (3a) or non conservative form (3b). The use of one of these two forms in the numerical treatment will be explicated in the next section.

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = \nabla \cdot (-p \mathbf{I} + \mathbf{D}) + \mathbf{f} \quad (3a)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) = \nabla \cdot (-p \mathbf{I} + \mathbf{D}) + \mathbf{f} \quad (3b)$$

where p is the pressure, \mathbf{f} a volumetric force (such as gravity) and \mathbf{D} the viscous stress tensor. While crossing the interface, viscous stress tensor and pressure follow the jump condition (4):

$$[(-p \mathbf{I} + \mathbf{D}) \cdot \mathbf{n}] = \sigma \kappa \mathbf{n} \quad (4)$$

where σ is the surface tension, κ is the local curvature, \mathbf{n} the unit vector normal to the interface.

3 Numerical code Dyjeat

In this paper, the numerical code DYJEAT [6] is employed. This code, in development at ONERA-Toulouse since 2004 has been used on various configurations related to atomization, including challenging high-density ratio cases such as water/air liquid sheet or cross-flow jet atomization [7][8].

In this paper, two numerical methods related to the discretization of mass and momentum equations are used and compared on the drop impact case : a Level-Set/Velocity Advection [6] and a CLSVOF/Conservative Momentum [12] schemes. Some terms, as the viscous and capillary terms, are treated in the same way in both methods. More details about the following section may be found in [9] and [12].

3.1 Level-Set (LS) - Velocity based advection

Mass and momentum equations are written using the velocity formulation stated in (2) (3b), and are solved by means of the projection algorithm of Chorin [14] on Cartesian Staggered meshes (MAC). In a first step, a predicted velocity field \mathbf{U}^* is obtained by solving the

momentum equation without taking into account the pressure gradient term (5). The divergence free property of the velocity field is then ensured by the projection step (7) where P^{n+1} must be obtained beforehand by solving the Poisson equation (6):

$$\mathbf{U}^* = \mathbf{U}^n + \Delta t^n \left(-(\mathbf{U}^n \cdot \nabla) \mathbf{U}^n + \frac{\mu}{\rho} \nabla \cdot (\nabla \mathbf{U}^n + (\nabla \mathbf{U}^n)^T) \right) \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla P^{n+1} \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{U}^*}{\Delta t^n} \quad (6)$$

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^* - \frac{\Delta t^n}{\rho} \nabla P^{n+1} \quad (7)$$

The interface is described implicitly by the use of the Level-Set function ϕ , defined as the signed distance from the interface. This scalar field is passively advected by solving a transport equation (8).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla (\phi) = 0 \quad (8)$$

In the previous equations, advection term are discretized using WENO5 schemes, viscous and pressure terms with a centered second order scheme, while temporal discretization is following a Runge-Kutta 2 scheme.

During the advection process, the Level-Set field can be distorted and no longer represents the distance from the interface. To minimize this effect, the reinitialization equation presented in equation (9) from [15] is used at each time step. A Runge-Kutta 3 is used for advancing the fictive time τ and Godunov fluxes for the Hamiltonian discretization.

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \text{sign}(\phi_{\tau=0}) (1 - \|\nabla \phi\|) \quad (9)$$

Performing reinitialization can shift interface position and is generally not convergent in time. For this reason, only three time steps are performed, which was empirically found as a good compromise to ensure field correction and minimize interface displacement.

Pressure and stress tensor jumps, including surface tension, are taken into account by using a Ghost-Fluid method [16]. In this method, the jumps are directly incorporated in the numerical discretization, by extending the continuous solution behind the interface, and adding a source term to take in account the discontinuity: this ensures proper discretization on both sides of the interface and a sharp jump representation. In Fig. 1, we consider a simple 1D case : in this example, the studied function is piecewise constant, with a jump at the interface between points x_i and x_{i+1} . The derivative is zero in each domain. To approximate the derivative

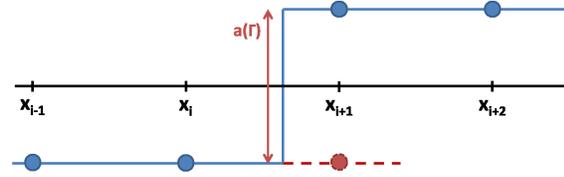


Fig. 1: A jump across the interface taken into account with Ghost fluid formulation

at the right of point x_i , the monophasic version would simply be :

$$\left(\frac{dF}{dx} \right)_{i+1/2} = \frac{F_{i+1} - F_i}{x_{i+1} - x_i}$$

which is here obviously non zero. The idea of the ghost fluid method is to substitute value at the point F_{i+1} by its ghost value defined by

$$F_{ghost,i+1} = F_{i+1} - a_\Gamma$$

where a_Γ is the jump of F while crossing the interface. Calculating the jump a_Γ is made possible by explicitly locating the interface with the help of the surrounding Level-Set values. The discretization then results in the single-phase formulation corrected by a jump term. The Level-Set function is used to compute the interface normal vector and the curvature.

The Level-Set formulation does not ensure mass conservation, as no conservation equation for liquid mass is solved. Any error in the position of the zero-contour directly translates in mass loss or gain. The same applies to momentum equation: in the solution of equation (3b), conservation is ensured by the zero-divergence constraint in the single-phase case, but individual phases ($\rho \mathbf{U}$) momentum conservation is not explicitly enforced. Moreover, there is no consistency between the mass and the momentum evolution which are evolved almost independently. These reasons have driven the development of the new algorithm described in the following section.

It has to be stated however that, for cases in which weak interface deformations occur, the Level-Set formulation may still perform reasonably well. A small shifting of the whole Level-set function can be imposed at each time-step to ensure global, but not local, mass conservation [6].

3.2 Conservative momentum (CMOM) algorithm

The Level-Set formulation, as stated before, presents difficulties for ensuring mass conservation. For this reason, we use a second method designated as conservative

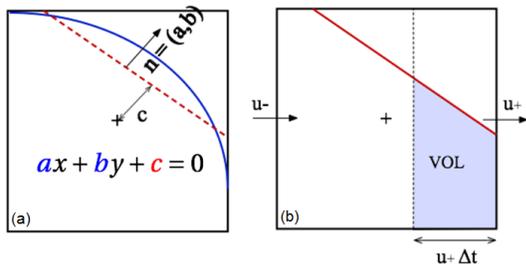


Fig. 2: (a) : Interface is approximated by a plane - PLIC reconstruction [10]. (b) : geometric computation of mass flux through east face of a velocity cell using PLIC reconstruction.

from now on, which brings two differences to the LS formulation.

First, the interface is described by both Level-Set and Volume-of-Fluid (VOF) variables. The VOF variable represents the liquid fraction contained in each computational cell. Coupling these two variables allows us to benefit from the mass conservation of VOF method and good precision in geometrical properties calculation thanks to LS use. In each mixed cells, the interface is approximated by a plane (PLIC reconstruction - Fig. 2a) . The plane is oriented by the use of the surrounding LS values, and shifted to ensure mass conservation using VOF variable. From the reconstructed plane, mass fluxes can be geometrically computed as described in [11]. It is indeed possible to geometrically locate the volume entering or leaving a computational cell during time step Δt using the normal velocity. In this volume, PLIC reconstruction provides liquid and mass fraction and thus mass fluxes can be accurately computed. (Fig. 2b) This treatment is applied in each direction using a splitting algorithm.

The second main difference with the LS-version concerns the momentum advection treatment. Recently, a new method has been developed and implemented by Orazzo & al. [12] hereinafter referred as Conservative MOMentum (CMOM), inspired by [13]. The momentum equation is written in the conservative form (3a) and treated with finite volume formulation. In the same way as for mass transport, momentum fluxes can be geometrically computed. The term $\rho\mathbf{U}$ is set equal to the mass fluxes calculated before since it appears in both advection terms: this treatment ensures consistency between mass and momentum conservation, and in that way provides the code with good robustness, even for high density ratio cases. This translates numerically to the solution of conservative forms for both equations, (10) and (11), in which consistency is ensured by the

use of the same mass fluxes ($\rho\mathbf{U}$) in both equations:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}) = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial (\rho\mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho\mathbf{U}) \otimes \mathbf{U}) = \nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \mathbf{D}) + \mathbf{f} \quad (11)$$

4 Study of a low energy impact on dry wall

When addressing drop impact phenomenon, a major part of literature is focused on low energy impacts, such as millimeter-sized droplets falling at a velocity of a few meters per second. These impacts may lead to deposition, rebound or secondary droplets formation (splash). For a long time, the segregation between these regimes has mainly been imputed to the droplet properties, with splash predicting models based on a combination of Reynolds and Weber number only [17]. However, it is now well known that target nature strongly influences the outcome of the impact. Concerning impact on solid surface, wettability or surface geometry (ie. rugosity or pattern) can promote one of these impact topologies [3]. The effect of wettability on smooth surface has remarkably been demonstrated by Yokoi et al. in 2009 [18] by experiments and axisymmetric simulation. In this section, we reproduce the results obtained by Yokoi et al [18] with 3D simulations by implementing contact angle model in the code DYJEAT.

4.1 Contact Angle Implementation

When a drop impacts a solid surface, a triple line is formed, and thus a contact angle is defined as the angle between the solid and the liquid/gas interface, as shown in Fig. 3. Without movement, this angle arises to satisfy a local equilibrium between the different molecular forces exerted on the triple point region. This contact angle is called the equilibrium contact angle θ_e and might be difficult to observe experimentally, since this equilibrium takes place on microscopic scale. Another contact angle can be defined at a macroscopic scale and called apparent contact angle. This last angle can take different values depending on contact line velocity (dynamic contact angle): its behavior is generally measured experimentally and fitted by a Tanner law [19], particularly relevant at a low Capillary number. Hysteresis comes to complicate the matter, as in a certain range of contact angles the triple line is fixed to the wall, while exceeding this range extrema makes the triple line to move again. This behaviour is generally explained by the presence of wall roughness or impurities, and thus difficult to be modelled in numerical simulations.

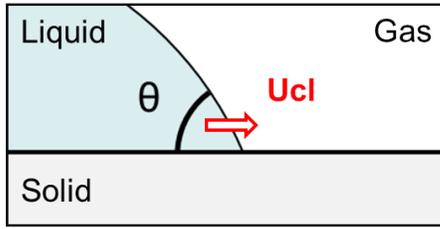


Fig. 3: Contact angle is defined as the angle in the liquid phase between the solid surface and the triple line. Its value depends of the contact line velocity U_{CL} [19].

In Yokoi experiment [18], a water drop of 2.28 mm diameter is considered, impacting with a velocity of 1 m.s^{-1} on a hydrophobic surface. Contact angle was measured and a correlation was proposed by Yokoi (12): this law consists in a Tanner law for high capillary number and degenerates to equilibrium contact angle as velocity tends to zero. A different behaviour is represented whether the contact line is advancing or receding. This law is adjusted to experimental data with the use of maximum advancing and receding dynamic contact angle $[\theta_{mda}, \theta_{mdr}]$ and parameters $[k_r, k_a]$ described as specific to solid properties. Images showing depositing process are shown in Fig. 4.

$$\theta_D = \begin{cases} \min \left[\theta_e + \left(\frac{C_a}{k_a} \right)^{1/3}, \theta_{mda} \right] & \text{if } U_{CL} \geq 0, \\ \max \left[\theta_e + \left(\frac{C_a}{k_r} \right)^{1/3}, \theta_{mdr} \right] & \text{if } U_{CL} < 0, \end{cases} \quad (12)$$

Contact angle effect practically results in a capillary force on the contact line acting as a spring to bring it back to equilibrium. To take this effect into account, one might directly implement a local force in momentum balance [20] or modify the interface geometry [21]. This second approach is in our opinion easier to implement in a solver using LS function. LS boundary condition under the solid surface is written as stated in (13) and take into account the contact angle. The VOF condition stay unchanged, since VOF ghost cells under the wall are not needed due to its impermeability.

$$\forall (x, y_{wall}, z), \partial_y \phi = -\sqrt{(\partial_x \phi)^2 + (\partial_z \phi)^2} \cot(\theta_D) \quad (13)$$

This boundary condition implies however the use of a local contact angle defined everywhere on the solid surface (even far from the contact line). Moreover, the level set field must be consistent with this boundary condition. To ensure these properties, the redistancing algorithm is rewritten as proposed by Xu et al [22]. Briefly resumed, dynamic contact angle is first calculated on each cell containing a contact line. Then, contact angle

is extended following the LS normal projected on the solid plane, by solving eq (14). This algorithm is processed during the reinitialization algorithm to directly propagate the information from the boundary condition to the nearby LS cells.

$$\forall (x, y = y_{wall}, z), \lambda \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \text{sign}(\phi) \mathbf{n}_s(\phi) \cdot \nabla_s \theta = 0 \quad (14)$$

where ∇_s is the surface gradient on the wall, \mathbf{n}_s the associated normal vector, and λ a parameter controlling the propagation speed of θ , typically set to the unity.

4.2 Results

In Yokoi et al [18], the impact has been experimentally recorded using high-speed camera and profiles have been compared to axisymmetric simulation. Here, 3D direct numerical simulation results are shown. As stated by the authors, a wrong estimation of the contact angle law produces an incorrect behaviour. A simulation with a constant static angle $\theta_e = 90^\circ$ leads indeed to a dramatic overestimation of capillary forces during the retraction phase which can even produce a drop rebound (Fig. 5).

However, a good spreading dynamic can be qualitatively and quantitatively obtained after Yokoi law implementation. Using LS algorithm with the moderate resolution of 58 cells per diameter ($\Delta^* = 58$), one can obtain a good visual agreement to Yokoi's images : spreading dynamic, rim formation and retraction behavior are all good indicators of code capabilities and validation criteria (Fig. 6).

Indeed, during spreading, contact angle tends to form an angle greater than θ_e due to the competition between inertia and viscous effects. If the contact angle obtained with contact angle law is smaller than this "natural" one, then the arising capillary forces will tend to accelerate the contact line. Here, the contact angle obtained from (12) is greater than θ_e which means that the spring force is less important, allowing the drop to deposit on the substrate without bouncing.

A further and more quantitative comparison has been carried out by measuring spreading diameter during the simulation, as it has been provided by Yokoi in his experiment. Diameter measured for three different grid sizes shows that even a coarse grid is sufficient to accurately capture the spreading dynamic (Fig. 7).

It is interesting to add a few remarks to the previous conclusion about present results. First of all, readers may notice that, at long time, axisymmetry is broken on Yokoi visualization, which may be due to initial droplet non-sphericity, or imperfection on the solid surface. Capillary waves are therefore travelling differently

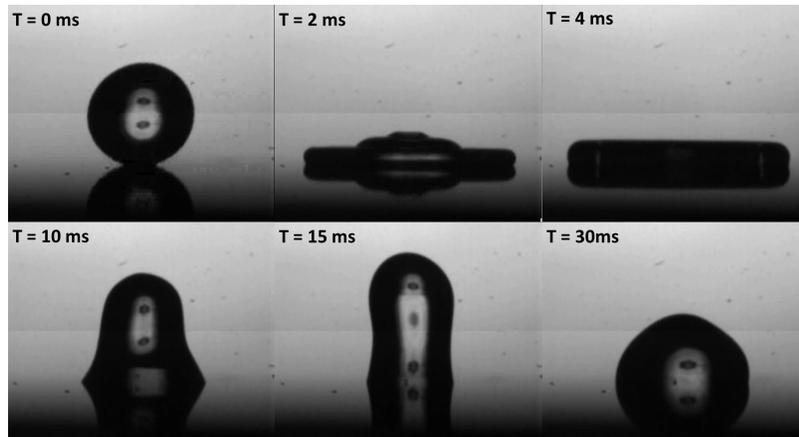


Fig. 4: Drop deposition process recorded by Yokoi [18]. $D = 2.28 \text{ mm}$, $U_D = 1 \text{ m.s}^{-1}$, $We = 32$, $Re = 2280$, $Ca = 0.01$
 Reproduced with kind permission of Yokoi.

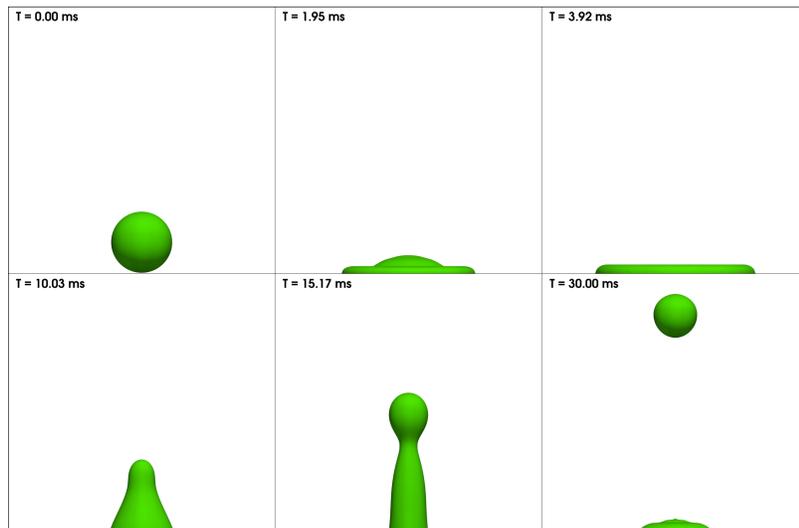


Fig. 5: Rebound obtained by using a static contact angle $\theta_{eq} = 90^\circ$, $\Delta = 39 \mu\text{m}$, $\Delta^* = \Delta/D = 58$

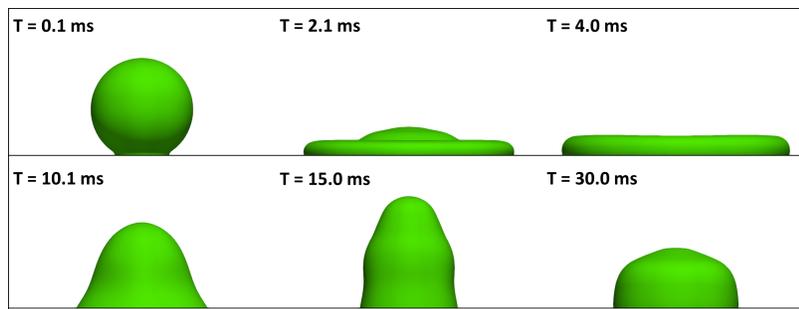


Fig. 6: Deposition obtained by using the dynamic contact angle law (12), $\Delta = 39 \mu\text{m}$, $\Delta^* = \Delta/D = 58$
 Dynamic law parameters : $\theta_{eq} = 90^\circ$, $\theta_{mda} = 114^\circ$, $\theta_{mdr} = 52^\circ$, $k_a = 9.10^{-9}$, $k_r = 9.10^{-8}$

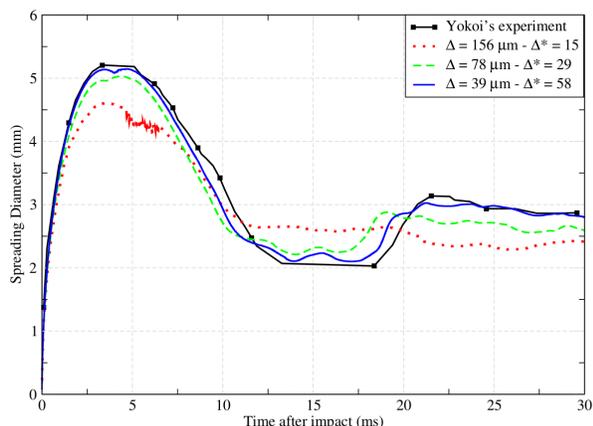


Fig. 7: Drop diameter obtained in simulation with different mesh sizes compared to Yokoi's measure.

in numerical simulation where the surface is perfect (smooth and impurity-free). This can explain the asynchronicity developed at long physical times between experiment and simulation and, in part, the difference in the diameter measurement. It is also interesting to notice that the law for dynamic contact angle includes two adjustment parameter k_r , k_a , which has been shown to be of primary importance on spreading dynamics in [18]. These parameters have been fitted by Yokoi so that axisymmetric simulations present good agreement to experimental data ; conducting the same calibration on 3D simulation would necessarily lead to slightly different results.

As a conclusion for this part, the numerical code DYJEAT produced good results in a full deposition situation. These results are extremely dependent on the contact law formulation and implementation, so that reaching very accurate results on contact line dynamics may lead to a very careful study of the contact angle law. A LS formulation is sufficient to explore this configuration, since low interface deformation and very low convective velocities are involved. In the next part, a higher energy impact will be considered in which the LS method alone shows its limits, while the dedicated CMOM formulation leads to very promising results.

5 Impact on a liquid film : crown and delayed splashing

Deposition is a possible outcome of a drop impact on a liquid film, it is however far less frequently encountered than on a solid surface. Indeed, the impact leads to a crater formation while liquid is ejected in a crown

shape. This crown can either be axisymmetric on low energy impact, or present regularly distributed instabilities leading to secondary droplets, or even take a more irregular form. Secondary droplets may be produced at the early stage of the impact (prompt splash) or by the jetting phenomenon at the top of the crown (delayed splash).

In this section, numerical simulations are conducted on one particular configuration experimentally explored by Cossali [23]: we focus on the impact of a 3.82 mm diameter water droplet on a water film of 2.57 mm with a velocity of 3.94 m.s^{-1} . In [23], impact is recorded by a CCD camera from both the bottom and the side of the impact area to provide access to crown characteristics. As a comparison, the Reynolds and Weber numbers are respectively 6 and 25 time greater than the case studied in the previous section, resulting in a more difficult configuration for numerical simulation.

We compare the simulated liquid shape to the images recorded during experiment. In particular, we focus on the crown expansion dynamic through diameter measurement. We found a very good qualitative and quantitative agreement by using the CMOM algorithm. The crown shape and jet instabilities are close to those observed on the picture taken by Cossali (Fig. 8) while crown diameter measurements follow closely the experimental points (Fig. 9). Error bars have been added by present authors on Cossali results from error margins estimated in [23]. Our numerical results are also subjected to measurement error, which has been evaluated at less than 3%. Error bars associated with this uncertainty have been displayed on the most refined case.

The widespread model of Yarin & Weiss [24] has been plotted and, as remarked by Cossali, do not fit the experimental data, even if used in its presumed validity domain. This arises as a warning signal and remind such model or correlation should be used as a predictive tool in exploratory configuration with extra caution [25].

If on the previous case, LS algorithm was sufficient to capture spreading dynamic, it is not the case for splashing. As the reader may notice, LS calculation results in significant errors on crown diameter (Fig. 9), due to aberrations in the early stage of the impact, when high velocities are involved due to impact pressure. Outside of this consideration, one can observe that the crown remains quite stable at the resolution explored and do not produce secondary droplet during crown elevation (Fig.10).

The last discussion of this section concerns grid convergence. Two grid sizes have been tested with the CMOM algorithm : no difference is shown on drop diameter (Fig.9). This is consistent with the results obtained by Guo and Lian [25], who showed a weak varia-

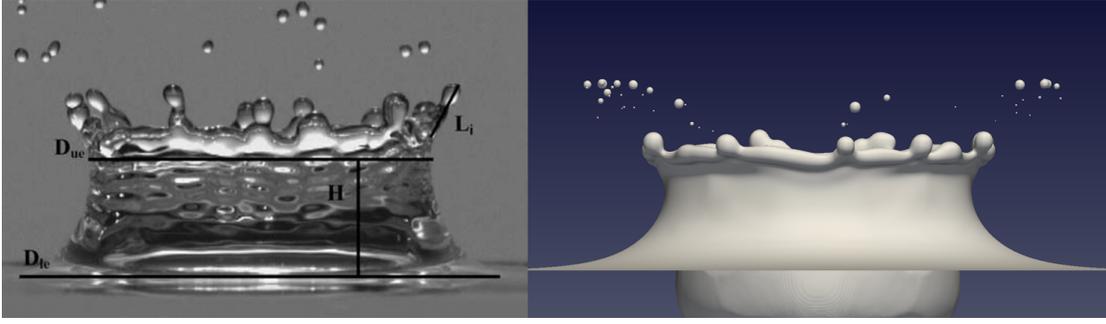


Fig. 8: Impact of water droplet on a liquid film and. Crown formation and delayed splashing. Left : Image recorded by Cossali [23], reproduced with his kind permission. Right : result from CMOM simulation. $\Delta = 30\mu m - \Delta^* = 127$ cells per drop diameter. $D = 3.82\text{ mm} - U_D = 3.94\text{ m.s}^{-1} - h_{film} = 2.57\text{ mm} - Re_l = 8400 - We = 8200$

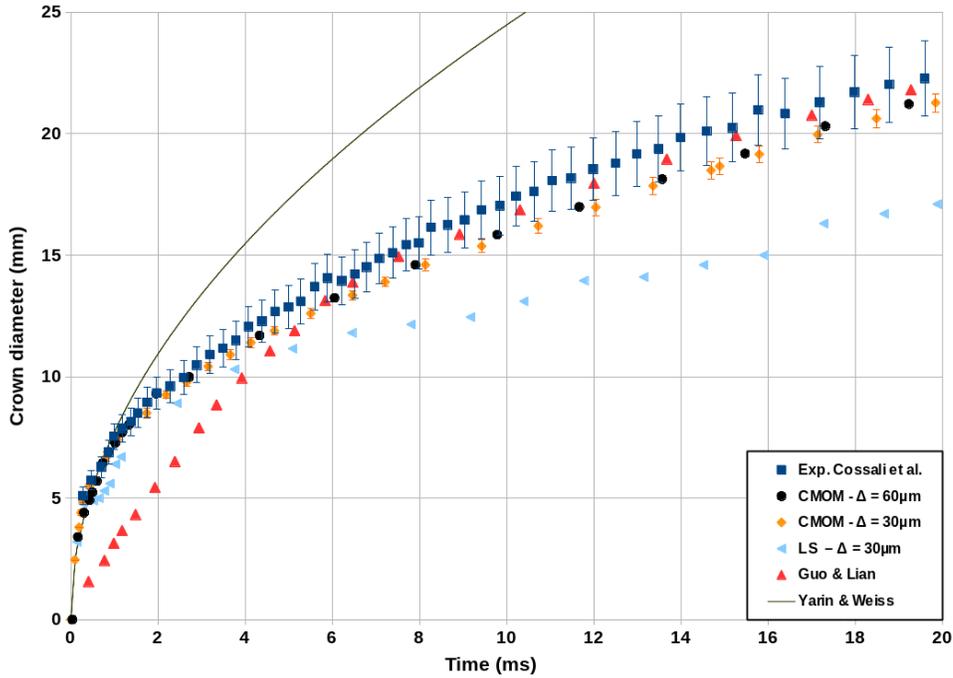


Fig. 9: Crown diameter measured at the base of the rim. Data measured by Cossali [23], results from present 3D simulations (CMOM and LS methods), results obtained by Guo & Lian [25], Yarin & Weiss model [24].

tion on this variable with resolution higher than 62 cells per diameter, and concluded on a converged simulation. However, some clear differences appear when looking at crown profile: on the fine grid, jetting is observed during crown elevation and a myriad of secondary droplets are produced, while on the coarse grid instabilities occur only when the crown is well developed (Fig. 11). When looking at the secondary droplets distribution in Fig.12, it may be noted that a fair amount of secondary droplets are found at $t = 2.5\text{ ms}$ in a diameter distribution centred around $130\ \mu m$. Practical experience with

code DYJEAT shows that, with the CMOM algorithm, droplets with at least 2 mesh points in the diameter may be tracked for long physical times. A large part of the droplets present in the fine grid simulation may therefore be tracked by the coarser grid. It seems in consequence that the coarser grid simulation is not able to capture the mechanisms underlying the formation of these droplets: instabilities leading to these secondary droplets have been totally smoothed due to insufficient mesh, even if the same mesh is sufficient to obtain a converged crown diameter.

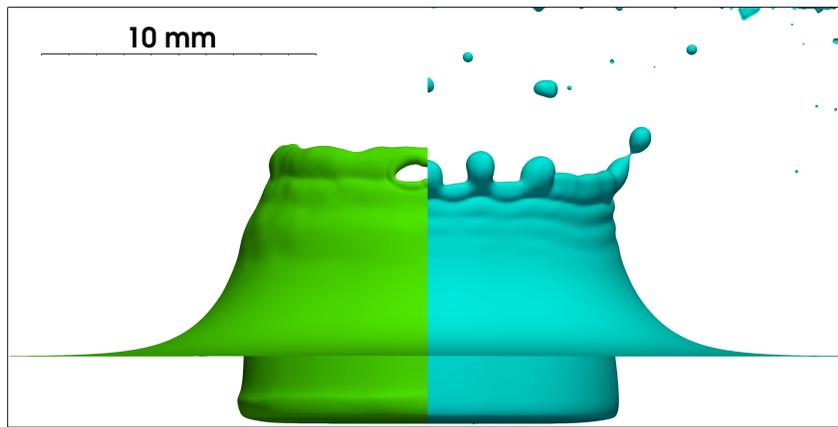


Fig. 10: Crown profile obtained 6.6 ms after impact with mesh size $\Delta = 30\mu m$. Left : Smooth crown obtained with Level Set calculation. Right : Jetting phenomenon and delayed splashing obtained with Conservative MOMentum algorithm.

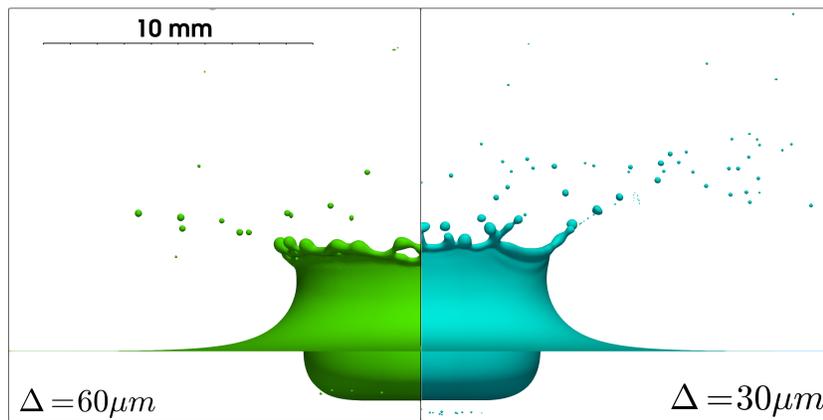


Fig. 11: Influence of grid resolution on splashing process with CMOM algorithm. Crown profile at $t = 2.5ms$ On the fine grid, droplets are emitted earlier in the process and in a larger number.

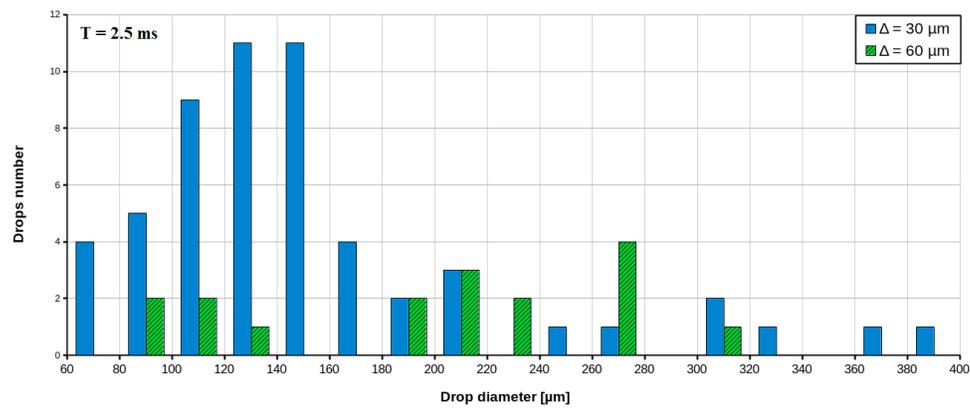


Fig. 12: Secondary droplets distribution at $t = 2.5 ms$ reported for two grids. Count made in the numerical domain (1/4 of the main drop simulated). Initial droplet diameter $D = 3.82 mm$.

Although a grid convergence should be regularly verified in a numerical simulation, this is particularly relevant for drop impact study due to the particular mechanisms underlying the secondary liquid structures.

To conclude this part, CMOM algorithm produces good results in both crown dynamic evolution and secondary droplets formation. LS method, however, failed on both due to weaker robustness and precision. Mesh convergence may be obtained for crown macroscopic quantities but not necessarily for instability growth. Cutting frequency associated with mesh size may not only avoid the survive of small secondary droplets, but also significantly restrain mechanisms leading to bigger droplets generation.

6 High velocity impact simulation

Drop impact on a solid surface may lead to deposition as we have seen in Section 4, but also to splash on higher velocity. Detailed comprehension of splashing mechanisms has known a renewed interest in the past decade, due to the possibility for camera to reach very high recording frequency up to 1M frames per second in a recent study [2]. However, splashing phenomenon has only been barely addressed using 3D direct numerical simulation due to high costs involved in such calculation. In 2018, Guo & Lian [25] proposed some high-velocities impact calculations, showing that current hardware resources now enable the community to address this problem.

At the same time, high-energy drop impacts have drawn the attention of the aviation community. Indeed, interaction between cloud droplets and plane wings or instrumentation belongs to this category: impact dynamic is there associated with icing, which is often involved in plane crashes. In this context, experimental studies have been conducted in ONERA : conclusions and experimental setup have been presented in [26]. These experiments provides a rare reference for numerical investigation on high velocity impact. Here, we focus on a impact of a $420 \mu\text{m}$ diameter water droplet on a smooth solid target, with an impact velocity of 20 m.s^{-1} . The associated Reynolds number and Weber number are respectively 4700 and 2300, so that the Reynolds number is the same order of magnitude as in previous case whereas the Weber number is 5 times larger. This configuration belongs to the splashing regime, as it may be seen on Fig.13.

A very thin and unstable crown is formed and secondary droplets are created all along the process. On the first and second image, we can distinguish micrometric droplets produced on the first microseconds after the contact, a clear manifestation of prompt splash-

ing. Jetting phenomenon is also visible during the early stages of the impact. Numerical simulation is conducted with a resolution of 900 nm , which is equivalent to a resolution of 470 cells per drop diameter.

A quarter of drop has been simulated to reduce mesh costs down to 500 M degrees of freedom. Full drop may be shown to improve figures readability. LS method has been used but systematically resulted in drop deposition : this confirms previous conclusions describing LS method as unsuitable to cope with this configuration. All the results discussed hereafter have so been obtained using CMOM algorithm.

With this algorithm, a prompt splash is obtained, generating about 50 secondary droplets (200 secondary droplets considering the full drop) in the first 3 microseconds. However, no crown is observed and a deposition occurs after the prompt splash phase. From this observation, several explanations may arise and are discussed hereafter.

It has been shown by experimental means that liquid lamella radially ejected during the impact lifts off and skates on a film of air [27]. This film of air may be of a few tens of nanometers thick only, and the interaction with the liquid lamella is yet to precise. Since such distance is of the same order of magnitude than the mean free path of air molecule, the associated effects fall in the scope of non-continuum mechanics [28]. It is obvious that such distance and effects are not resolved by present solver and mesh resolution. Lowering mesh size to this distance while keeping the full drop geometry would imply equivalent resolution hundreds of billions of computing cells, which is hardly accessible today, even with adaptive mesh refinement technologies.

However, interaction between the liquid lamella and this air layer is not the only effect to play a role in splashing mechanism, since suction effect on the top of it tend to promote crown formation [29]. This effect has a lower impact when considering a lower gas density, which could partly explain the results obtained by Xu & Ren [5].

Since 1980's, many studies have proposed a criterion to predict splashing transition, frequently based on the splashing parameter only proposed by Stow & Hadfield [30] (Eq. 15), but this parameter doesn't take into account the air related effect mentioned before:

$$K = We\sqrt{Re} \quad (15)$$

To study this trend qualitatively, an extreme case is tested by multiplying air density by ten, so that the liquid/gas density ratio is hundred. Effect of air density is presented in (Fig.14).

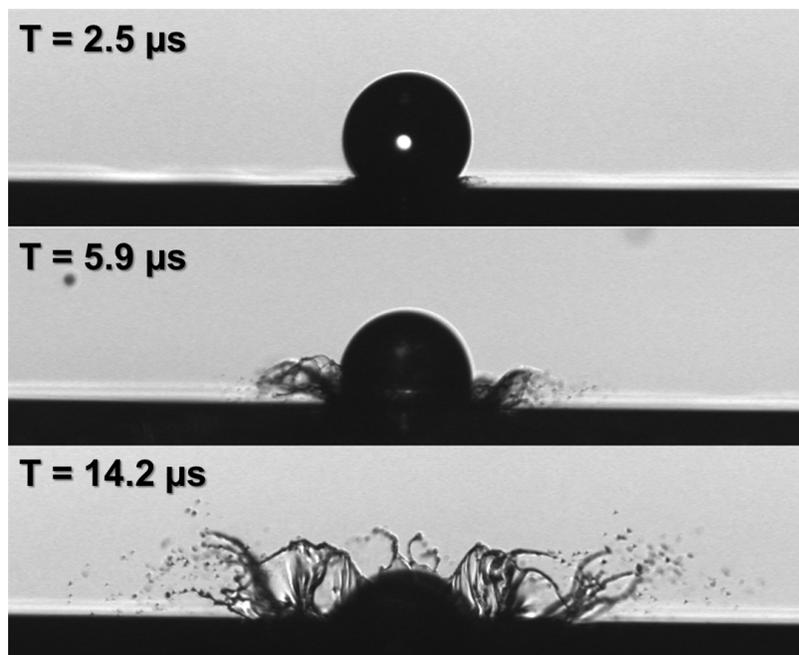


Fig. 13: Images obtained from different impacts recorded at three times. Water droplet of diameter $D = 420\mu\text{m}$ is accelerated to reach $V_D = 20\text{m.s}^{-1}$ when contacting with the wall. Prompt splash is observed at the beginning of the impact, followed by an unstable crown formation.

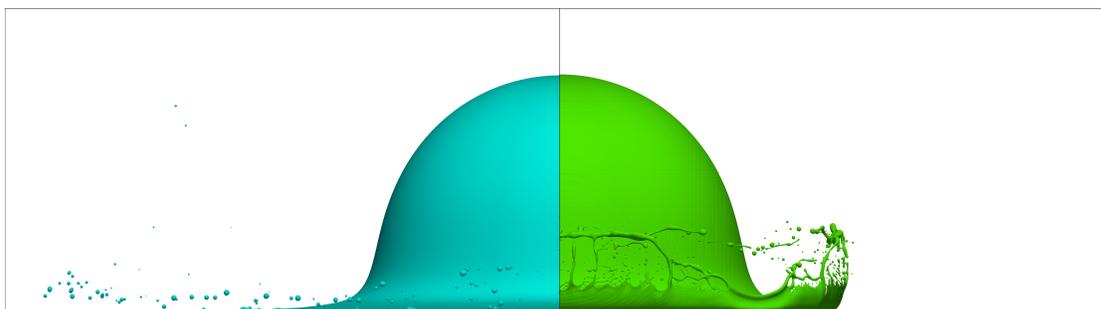


Fig. 14: Influence of gas density on impact topology ($t = 6.9\mu\text{s}$). $D = 420\mu\text{m} - U_D = 20\text{m.s}^{-1} - Re_l = 4700 - We = 2300$
 Left : $\rho_g = 1.2\text{kg.m}^{-3}$ - Only prompt splashing occurs. Right : $\rho_g = 12\text{kg.m}^{-3}$ - An unstable crown is formed.
 $\Delta = 900\text{nm} - \Delta^* = \Delta/D = 467$ cells per drop diameter

Lamella lifts off and a crown is obtained, which shows that a splash can be obtained without the "skating phenomenon" described before. Suction effect might so be a predominant effect in high velocity impact. In the same figure, we show that crown is very unstable and liquid sheet is broken earlier than in experiment (Fig.13), which could be reduced by increasing mesh resolution.

Until here, the assumption of a dry wall has been made. In the experimental device, a water droplet stream is generated and a lot of impacts are recorded. Even if droplets are separated by tens to hundreds of diame-

ter, and that the air used to accelerate the droplets is supposed to drive off the water from the solid surface, it is still possible that a thin residual film is present on the impact target. In order to evaluate the effect of this assumption, a $5\mu\text{m}$ -thick film is added to the simulation, so that the normalized thickness of the film h^* is $h^* = h_{film}/D_{drop} = 0.01$. Simulation result is presented in Fig.15.

A well resolved crown emerges with a remarkably axial-symmetric shape. Jetting occurs, generating a myriad of secondary droplets. In the same way as for low velocity impact, a thin liquid film does promote splash-

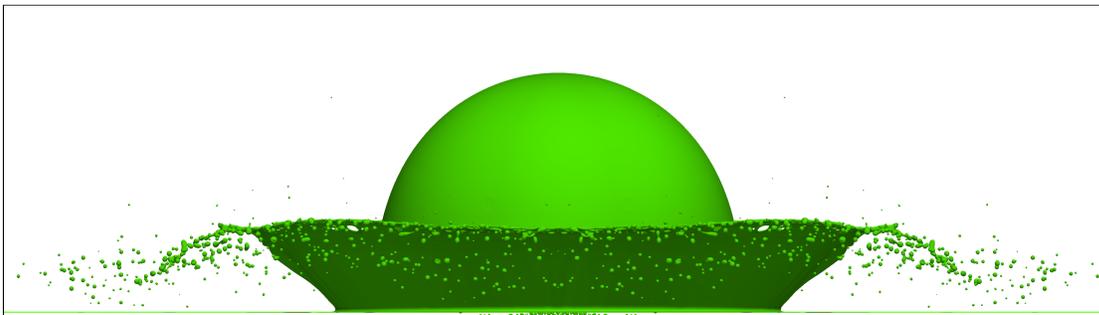


Fig. 15: Drop impact on a $5\mu\text{m}$ -thick film. $h^* = h/D = 0.01$ - Strong influence of the liquid film on impact topology. A crown is formed with remarkable symmetry properties. Secondary droplets are generated and mark a delayed splashing.

ing for high velocity impact. From this discussion, it emerges that a special attention must be paid to the tuning of numerical case so that it properly reflects the experimental configuration; otherwise it could result in false conclusions.

7 Conclusion and future directions

In this paper, we showed that a low velocity impact on a smooth wall can be accurately reproduced by Direct Numerical Simulation with relatively low efforts, as long as a correct law is chosen for dynamic contact angle. Obviously, detailed study focused on contact line movement requires a lot more work, but the methodology presented in this paper is relevant to study macroscopic influence of wettability on impact topology. An impact on liquid pool at higher energy has shown the importance of using conservative and accurate numerical methods, even for macroscopic characteristics as crown diameter. Capturing smaller scale phenomena like secondary droplet formation is much harder to capture and needs much finer meshes. Exploration of high velocity impact and splashing shows that a lot of numerical difficulties arise from this configuration: highly multi-scale phenomena require very small mesh sizes, well under a hundredth of the droplet diameter; non-continuum effects may also be involved in splashing mechanism. From this last remark, the commonly used term "DNS" might be questioned and be understood in this paper as "Direct discretization of incompressible Navier-Stokes equations with the finest possible mesh". A true approach of all scales would here imply a solver at a molecular scale. However, we showed that a splash may be obtained with incompressible effects only, by changing air density or assuming a slightly wetted wall, which extend the observation made on low energy impacts. These effects and associated mechanisms must

be properly studied, and the same consequences might be obtained by further increasing impact velocity.

Acknowledgements We warmly thank Pierre Berthoumieu and Virgine Bodoc for conducting experiments on this challenging subject, and Pierre Trontin for his feedback on this work. Sincere thanks also to regional calculation center CALMIP for giving us the opportunity to perform the calculations presented in this article on their new supercomputer OLYMPE [31].

This work was granted access to the HPC resources of CINES under the allocation 2017 - A0032B06115 made by GENCI. This work was granted access to the HPC resources of CALMIP under the allocation 2018 - Project 18043.

Compliance with Ethical Standards: The authors declare that they have no conflict of interest.

References

1. Worthington AM. On the forms assumed by drops of liquids falling vertically on a horizontal plate. *Proc Roy. Soc. Lond.* 25:261 (1876)
2. Li E.Q., Thoroddsen S.T., Time-resolved imaging of a compressible air disc under a drop impacting on a solid surface, *J.Fluid Mech.*,vol.780, pp. 636-648 (2015)
3. Josserand C., Thoroddsen S.T., Drop impact on a Solid Surface. *Annual Review of Fluid Mechanics, Annual Reviews*, vol.48, pp. 365-391 (2016)
4. Liang G., Mudawar I., Review of mass and momentum interactions during drop impact on a liquid film, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol.101, pp. 577-599 (2016)
5. Xu L., Zhang W.W., Nagel S.R., Drop splashing on a dry smooth surface. *Phys. Rev. Lett.* (2005)
6. Couderc F., Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles : application la dsintgration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux, PhD Thesis (2007)
7. Lagrange I., Orazzo A., Zuzio D, Estivalèzes J.L., Immersed Interface Method for the Direct Numerical Simulation of air-blast primary atomization, Conference Paper : ILASS-Americas. (2017)
8. Zuzio D., Estivalèzes J.L., DiPierro B., An improved multiscale Eulerian-Lagrangian method for simulation of atomization process, *Computer and Fluids* (2016)

9. Lagrange I., Méthode d'interface immergée pour la simulation directe de l'atomisation primaire, PhD Thesis (2018)
10. D. L. Youngs , Time-Dependent Multi-material Flow with Large Fluid Distortion, in K. W. Morton and M. J. Baines (eds.), Numerical Methods for Fluid Dynamics , vol. 24, pp. 273-285, Academic Press , New York , 1982.
11. Sussman M., Puckett E.G., A coupled Level Set and Volume-of-Fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, vol.162 (2000)
12. Orazzo A., Lagrange I., Estivalzes J.L., Zuzio D., A VOF-based consistent mass-momentum transport for two-phase flow simulations. *ASME Proceedings - 17th International Symposium on Numerical Methods for Multiphase flow* (2017)
13. Vaudor G. et al., A consistent mass and momentum flux computation method for two phase flows. Application to atomization process. *Computers and Fluids*, vol. 152, pp 204-216 (Jul. 2017)
14. Chorin A., Numerical solution of Navier-Stokes equations, *Mathematics of Computation*, 22, 745-762 (1968)
15. Sussman M. et al., A Level Set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, vol. 114, pp. 146-159 (1994)
16. Fedkow R. et al. A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the Ghost Fluid Method). *Journal of Computational physics*, vol. 152, pp.457-492 (1999)
17. Droplet-wall collisions: experimental studies of the deformation and breakup process. *Int. J. Multiphase flow*, vol.21, pp.151-173 (1995)
18. Yokoi K., Vadillo D., Hinch J., Hutchings I. Numerical studies of the influence of the dynamic contact angle on a drop impacting on a dry surface. *Physics of Fluids*, vol.21 (2009)
19. Tanner L. H. The spreading of silicone oil drops on horizontal surfaces. *J. Phys. D* (1979)
20. Sikalo S., Wilhelm H.D., Roisman I.V., Jakirlic S., Tropea C., Dynamic contact angle of spreading droplets: Experiments and simulations, *Physics of Fluids*, Vol.17 (2005)
21. Griebel M., Klitz M. , Singular Phenomena and Scaling in Mathematical Models, pp.297-325. Springer International Publishing (2014)
22. Xu S., Ren W., Reinitialization of the Level-Set Function in 3D Simulation of Moving Contact Lines, *Communications in Computational Physics*, Vol.20, pp. 1163-1182 (2016)
23. Cossali G.E., Marengo M, Coghe A., Zhdanov S., The role of time in single drop splash on thin liquid film. *Experiments in Fluids*, vol.36, pp.888-900 (2004)
24. Yarin A. L., Weiss D. A., Impact of drops on solid-surfaces: Self-similar capillary waves, and splashing as a new-type of kinematic discontinuity, *J. Fluid Mech.* 283,pp. 141-173 (1995).
25. Guo Y., Lian Y. High-speed oblique drop impact on thin liquid films. *Physics of Fluids*, vol 29 (2017)
26. Berthoumieu P., Djean B., Experimental investigation of SLD impact phenomena, 7th european conference for aeronautics and space sciences (EUCASS) (2017)
27. Kolinski et. al., Skating on a film of air: Drops impacting on a surface. *Physical Review letters* (2012)
28. Liu Y., Tan P., Xu L. Kelvin-Helmholtz instability in an ultrathin air film causes drop splashing on smooth surfaces. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 112 (2015)
29. Bischofberger I., Mauser K.W., Nagel S.R. Seeing the invisible-Air vortices around a splashing drop. *Phys.Fluids*, vol.25 (2013)
30. Stow C.D., Hadfield M.G. An experimental investigation of fluid flow resulting from the impact of a water drop with an unyielding dry surface. *Proc. Royal Soc. London. A. Math. Phys. Sciences.* (1981)
31. See description at : <https://www.calmip.univ-toulouse.fr/>