



HAL
open science

Caractérisation numérique des courbures et des normales aux interfaces d'écoulements diphasiques

Désir-André Koffi Bi

► **To cite this version:**

Désir-André Koffi Bi. Caractérisation numérique des courbures et des normales aux interfaces d'écoulements diphasiques. Sciences de l'environnement. Université Gustave Eiffel, 2021. Français. NNT: . tel-04086090

HAL Id: tel-04086090

<https://hal.science/tel-04086090>

Submitted on 1 May 2023

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.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

École doctorale n° 531 : Sciences, Ingénierie et Environnement

THÈSE

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Gustave Eiffel

Spécialité “Mécanique”

présentée et soutenue publiquement par

Désir-André Koffi Bi

le 13 Décembre 2021

Caractérisation numérique des courbures et des normales aux interfaces d'écoulements diphasiques

Devant le jury composé de:

J.-L. Estivalezes	Pr associé	IMFT - INP Toulouse	Rapporteur
S. Zaleski	Pr	∂'Alembert - Sorbonne Université	Rapporteur
M. Massot	Pr	École Polytechnique	Examinateur
T. Sayadi	CR CNRS	∂'Alembert - Sorbonne Université	Examinatrice
S. Vincent	Pr	MSME - UGE	Directeur
E. Chénier	MCF-HDR	MSME - UGE	Co-directeur

Résumé

Caractérisation numérique des courbures et des normales aux interfaces d'écoulements diphasiques.

Les écoulements diphasiques sont rencontrés dans des domaines variés tels que le transport, la santé, l'industrie. Ils font l'objet de nombreux travaux, car ils possèdent une richesse et une diversité tant au niveau des phénomènes physiques s'y déroulant, des paramètres physicochimiques impliqués et des échelles rencontrées.

Quelle que soit la stratégie de simulation des écoulements diphasiques, un élément clé dans leur modélisation est la prise en compte des forces de tensions de surface. Elles font intervenir les propriétés géométriques de l'interface, à savoir la courbure et la normale. La bonne évaluation de ces éléments est capitale, car hormis la discrétisation des termes de forces de tensions de surface, une mauvaise estimation de la courbure et de la normale induit la création de courants parasites à l'interface. Par ailleurs, la courbure et la normale sont utilisées dans d'autres applications telles que l'évaporation, le décompte de gouttes dans un spray ou l'établissement de PDF (Probability Density Function) de tailles de gouttes. Ces données fournissent des informations globales (aire interfaciale, distribution de taille de gouttes) mais ne renseignent pas sur les différentes formes de gouttes/bulles potentiellement rencontrées dans un écoulement diphasique comme le montre le diagramme de Clift. C'est dans ce cadre que s'inscrit ce travail qui se veut être une étape préliminaire dans une caractérisation numérique et automatique des courbures et des normales aux interfaces d'écoulements diphasiques. La finalité est de pouvoir constituer une base de données d'informations permettant de caractériser des interfaces et d'opérer leur identification automatique.

Un des premiers volets consiste en la mise en place d'une méthode pour décrire l'interface 3D et suivre son évolution topologique au cours du temps. La technique du front-tracking (FT) a été choisie, car elle offre la connaissance explicite de la position de l'interface, premier jalon pour en déduire sa courbure et sa normale. Tout un ensemble de procédures 3D de gestion du maillage et de conservation/contrôle de volume ont été entièrement développées pendant ce travail et implémentées dans un code maison FUGU. Des tests de convergence ont également été menés.

Par la suite, tout un ensemble de méthodes existantes permettant d'accéder à la courbure et la normale grâce au maillage de l'interface issu du FT a été considéré avec des intercomparaisons. Deux cas de figure sont présentés pour rendre compte de la précision et la robustesse des méthodes quant à l'évaluation de la courbure et la normale : un test statique regroupant une grande variété de courbures et un test dynamique original issu de ce travail.

Enfin, une quantité statistique permettant de caractériser les interfaces est introduite et analysée. Elle utilise les courbures évaluées par les méthodes les plus robustes de la partie précédente. Elle est appliquée à différentes interfaces relatives au diagramme de Clift et les résultats sont interprétés.

Mots-clés — suivi d'interfaces 3D ; diphasique ; tension de surface ; courbure ; caractérisation d'interface

Abstract

Numerical characterisation of curvatures and normal vectors at multiphase flows interfaces.

Multiphase flows are encountered in various fields such as transportation, healthcare and industry. They are the subject of numerous studies as they possess a richness and diversity of physical phenomena, involve many physicochemical parameters and scales.

Whatever the strategy employed to simulate multiphase flows, a key element in their modelling is taking into account surface tensions. They depend on the geometric properties of the interface, namely the mean curvature and the normal vector. The correct evaluation of these elements is crucial because apart from the discretisation of the surface tensions terms, a wrong estimation of the curvature and the normal vector induces the creation of parasitic currents at the interface. In addition, the curvature and the normal vector are used in other applications such as evaporation, counting drops in a spray or establishing the PDF (Probability Density Function) of drop sizes. These data provide global information (interfacial area, drop size distribution) but do not enlighten on the different droplet/bubble shapes potentially encountered in a multiphase flow as shown in Clift diagram. It is within this framework that this work is intended to be a preliminary step in a numerical and automatic characterisation of curvatures and normal vectors at multiphase flows interfaces. The aim is to be able to build a database allowing the characterisation of interfaces and their automatic identification.

One of the first components consists of setting up a method for describing the 3D interface and follow its topological evolution over time. The front-tracking (FT) technique was chosen as it offers explicit knowledge of the position of the interface which is the first step in deducing its curvature and normal vector. A whole set of 3D procedures for mesh management and volume control/conservation were fully developed during this work and implemented in the FUGU in-house code. Convergence tests were also carried out.

Subsequently, a set of existing methods for accessing the curvature and normal vector through the interface mesh from the FT was considered with intercomparison. Two cases are presented to account for the accuracy and robustness of the methods in the evaluation of the curvature and the normal vector : a static test with a large variety of curvatures and an original dynamic test developed in this work.

Finally, a statistical quantity to characterise the interfaces is introduced and analysed. It uses the curvatures evaluated by the most robust methods of the previous part. It is applied to different interfaces relative to Clift diagram and the results are interpreted.

Keywords — front-tracking 3D ; multiphase ; surface tension ; curvature ; interface characterisation

Table des matières

1	Introduction	19
1.1	Écoulements diphasiques : diversité et physique multi-échelle	19
1.2	Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques	22
1.2.1	Modèle 2-fluide	22
1.2.2	Modèle 1-fluide	24
1.2.3	La méthode Volume of Fluid (VOF)	26
1.2.4	La méthode Moment-Of-Fluid (MOF)	27
1.2.5	La méthode Level-Set (LS)	27
1.2.6	La méthode Front-Tracking (FT)	28
1.2.7	Les méthodes mixtes	29
1.3	De l'utilité d'une bonne évaluation des données géométriques de l'interface	30
1.3.1	Formulations des forces de tensions de surface	30
1.3.2	Estimation de la courbure et la normale	32
1.3.3	Exemples de l'utilité des approches de traitement des forces de tension de surface et de l'évaluation de la courbure et la normale	34
1.4	Plan de la thèse	36
2	Gestion du maillage de l'interface	45
2.1	Notation	45
2.2	Transport des marqueurs de l'interface	48
2.3	Enrichissement	49
2.3.1	Un nouvel élément : $(n_e^{(n)} - 3) = 1$	52
2.3.2	Deux nouveaux éléments : $(n_e^{(n)} - 3) = 2$	53
2.3.3	Trois nouveaux éléments : $(n_e^{(n)} - 3) = 3$	54
2.4	Désenrichissement	55
2.5	Amélioration de la qualité du maillage	57
2.5.1	Échange d'arête	57
2.5.2	Lissage	60
2.5.3	Suppression de mauvais triangles	61
2.6	Conservation du volume	61
2.7	Validation - Interface sphérique dans un champ tourbillonnaire	63
3	Accuracy and convergence of the curvature and normal vector discretizations for 3D static and dynamic front-tracking interfaces	71
3.1	Introduction	72
3.2	Num. methods for eval. κ , \mathbf{n} and \mathbf{f}	74
3.2.1	Main mathematical notations	74
3.2.2	Discretization of the Laplace-Beltrami Operator (LBO-methods)	75
3.2.3	Integral Formulation of the surface tension (IF-methods)	76
3.2.4	Surface Reconstruction (SR-methods)	78
3.2.5	Discrete surfaces and solution accuracy	79

3.3	Analysis of a stationary surface	80
3.3.1	Results	81
3.3.2	Comparisons	85
3.3.3	Summary	87
3.4	Analysis of advected surfaces	88
3.4.1	Problem presentation	88
3.4.2	Ligament formation – Case $Q < 0$	90
3.4.3	Bubble shape – Case $Q > 0$	93
3.4.4	Summary	96
3.5	Conclusion	96
4	Identification d’objets grâce à leurs propriétés surfaciques	103
4.1	Précision des méth. de calc. de κ sur un nuage de gouttes de forme sphé.	103
4.1.1	Mise en œuvre de l’étude	104
4.1.2	Grandeurs enregistrées	106
4.1.3	Résultats et analyse	106
4.2	Echelles intermédiaires - Caractérisation des ligaments	112
4.2.1	Distribution surfacique de courbure	112
4.2.2	Méthodologie de l’étude numérique	113
4.2.3	Résultats et analyses	119
4.3	Ellipsoïdes déformées par des fonctions sinueuses et variqueuses	126
4.3.1	Déformation sinueuse	130
4.3.2	Déformation variqueuse	134
5	Conclusion générale et perspectives	145
A	La méthode de Cardan	149
B	Calcul de la courbure par la méthode LBO - Cas d’un sommet à 3 triangles	151
C	Complément sur les comparaisons de méthodes	157
C.1	Errors for 20%-disturbed meshes	157
D	Complément sur les méthodes de Reconstruction de Surface	161
D.1	Peculiar stencil for the calculation of the SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 method	161
E	Effet de la pondération dans les méthodes SR	165
E.1	Analyse de l’infl. de la pond. et des perturb. sur la distrib. surf.	165
F	Calcul exact de la distribution surfacique df_S pour des ellipsoïdes	173

Table des figures

1.1	Exemples d'écoulements diphasiques, mettant en jeu différentes échelles.	20
1.2	Coalescence de deux bulles [18].	23
1.3	Différents méthodes de reconstruction de l'interface à partir de la fonction couleur C_k issue de modélisation VOF.	26
1.4	Isosurfaces de la fonction Level-set Φ . L'interface est située à $\Phi = 0$. Le signe de Φ permet de connaître la phase où on se situe.	28
1.5	Bulle/goutte modélisée par la méthode Front-Tracking (FT). Des marqueurs recouvrent la surface et forment des triangles dont la taille moyenne des arêtes est d . La grille eulérienne a une résolution d'espace h	29
1.6	Évolution du maximum d'intensité Ca_{\max} des courants parasites dans le domaine de simulation au cours du temps (Fig.3 de [1]).	35
2.1	Le volume Ω est délimité par une surface $\partial\Omega$. La normale extérieure \bar{n}_{ext} pointe vers le milieu extérieur à Ω	45
2.2	Numérotation des marqueurs de l'élément e selon les valeurs de n_e	47
2.3	L'élément triangulaire initial e , constitué des marqueurs $m_{[e,i]}, i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket$, a ses arêtes 1 et 2 trop grandes, ce qui entraîne l'ajout des marqueurs supplémentaires $m_{[e,4]}$ et $m_{[e,5]}$ pour les scinder. L'orientation ou ordre de la numérotation est donnée par la normale sortante \bar{n}_{ext}	48
2.4	La surface de la sphère est maillée par des triangles. Les sommets sont transportés et suivent les changements topologiques de l'interface	49
2.5	Détermination de la vitesse des marqueurs par la méthode <i>PERM</i> . Elle est obtenue à partir des vitesses adjacentes issues du maillage eulérien.	49
2.6	Sphère au maximum de déformation ($t = T/2$) dans un champ incompressible de vitesse (Eq. (2.10)). Les deux sphères ont le même maillage initial. A gauche (a), nous n'appliquons pas d'enrichissement. A droite (b), l'enrichissement est activé.	50
2.7	L'élément e est constitué de 4 segments (a). Deux nouveaux éléments e' et e'' sont formés et l'élément e est supprimé. Les connectivités sont mises à jour (b).	52
2.8	L'élément e est formé de 5 segments (a). Trois nouveaux éléments e' , e'' et e''' sont créés et l'élément e est supprimé. Le choix de construire les trois éléments et de les disposer dans cet ordre est fixé. Les voisins sont également mis à jour (b).	53
2.9	L'élément e possède 6 segments (a). Quatre nouveaux éléments e' , e'' , e''' et e'''' sont créés tandis que l'élément e est supprimé. Les voisins sont également mis à jour (b).	54
2.10	L'arête 1 (rouge) de l'élément e remplit les conditions pour être supprimer (a). Les marqueurs des voisins ne changent pas. Seules les coordonnées de $m_{[e',2]}$ et $m_{[e'',3]}$ sont changées. Ils ont pour coordonnées le milieu de l'arête 1 de l'ancien élément e . Dans cette configuration, l'élément e' se retrouve renversé, situation qu'il faut éviter (b).	56

2.11	L'arête 1 de l'élément e est courte et remplit les conditions pour être supprimé (a). Après la procédure, e et e' sont effacés. Les voisins sont également mis à jour (b).	57
2.12	L'arête 1 (rouge) de l'élément e est échangée pour rendre les éléments e et e' les plus équilatéraux possibles.	58
2.13	Variation de volume engendrée par l'échange d'arête entre les éléments e et e' .	58
2.14	L'arête 1 (rouge) de l'élément e est échangée. Le triangle e' voit sa normale inchangée après l'opération. Ce qui n'est pas le cas du triangle e , dont la normale pointe après vers l'intérieur.	59
2.15	Le lissage met $m_{[e,1]}$ au barycentre des marqueurs de son premier voisinage.	60
2.16	Un élément en aiguille (a) et un élément plat (b) à retirer du maillage lagrangien.	61
2.17	Le volume se calcule en faisant la somme des volumes des tétraèdres construits à partir des triangles de l'interface et d'un point de référence.	62
2.18	Évolution d'une interface sphérique dans un champ tourbillonnaire, avec $\Delta t = 10^{-3}$ et $h = 1/80$. De gauche à droite, l'interface est représentée aux instants 0, $T/10$, $T/5$ et $T/2$, le maximum de déformation.	64
2.19	Différents instants de l'interface à 0, $T/15$, $2T/15$, $3T/15$, $4T/15$, $5T/15$, $6T/15$, $7T/15$, $9T/15$, $11T/15$, $13T/15$ et T , tirés de [30].	64
2.20	Écart entre un marqueur du maillage grossier et l'interface du maillage de référence.	65
2.21	Le marqueur m se trouve dans la cellule (i_0, j_0, k_0) . Les premiers éléments $e \in \mathcal{E}_{ref}$ rencontrés sont localisés dans la première couronne (zone blanche). Cependant, la distance r_m établie avec ces éléments est plus grande que celle construite avec les éléments de la deuxième couronne (zone verte), r'_m .	65
2.22	Le point d'intersection entre la droite partant de m , de vecteur directeur n_e , et la plan (\mathcal{P}_e) peut se trouver dans trois différentes zones. S'il est dans la zone 1 (intérieur de e), alors $I = H_1$. S'il est dans la zone 2, alors $I =$ projeté orthogonal de H_2 sur l'arête. Dans la zone 3, I est un sommet de e . H_3 est proche de $m_{[e,2]}$ donc $I = m_{[e,2]}$.	66
2.23	Erreurs spatiales en norme L_2 (triangle) et L_∞ (carré) en fonction de la taille h des cellules de discrétisation du domaine.	67
3.1	Notations and stencil for the discrete LBO methods [31, 76]	75
3.2	Construction of the mixed area \mathcal{A}_{mixed} of the discrete LBO, according to MEYER et al. [76] and ESSADKI [31]	76
3.3	Stencil for the original [123] method of the Integral Formulation (IF-Trygg. method)	77
3.4	Stencil for the 'triangle version' of the Integral Formulation (IF-triang. method)	77
3.5	Top (left) and side (right) views of the discrete mesh projected onto the surface (3.23).	81
3.6	LBO methods - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$	81
3.7	LBO methods - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$	82
3.8	Integral Formulation - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$	83
3.9	Integral Formulation - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$	83
3.10	Surface Reconstruction - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ , $p = 0\%$	84
3.11	Surface Reconstruction - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on \mathbf{n} , $p = 0\%$	84
3.12	Surface Reconstruction - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ , $p = 20\%$	84

3.13	Surface Reconstruction - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on \mathbf{n} , $p = 20\%$	85
3.14	Synthesis - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$	85
3.15	Synthesis - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$	86
3.16	Variation of the relative errors as a function of the maximum amplitude p of the perturbations	86
3.17	Relative errors on κ in function of the time in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms, with (a) $p = 0\%$ and (b) $p = 20\%$	87
3.18	Choice of the reference value to compute the relative errors.	90
3.19	Bottom and side views of the discrete mesh transported in a spherical velocity field, $Q < 0$	91
3.20	Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms for κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$ with exact transport - $Q < 0$	91
3.21	Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms for κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$ with Lagrangian transport - $Q < 0$	92
3.22	Relative errors on κ (a) and \mathbf{n} (b) according to CPU time in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms, $p = 0\%$ - $Q < 0$ and numerical transport.	93
3.23	Top and side views of the discrete mesh transported in a spherical velocity field, $Q > 0$	94
3.24	Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$ with exact transport - $Q > 0$	94
3.25	Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$ with Lagrangian transport - $Q > 0$	95
3.26	Relative errors on κ (a) and \mathbf{n} (b) according to CPU time in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms, $p = 0\%$ - $Q > 0$	96
4.1	Gouttes sphériques avec différentes résolutions de courbure $d_r = 1/2r$, $r = 1, 10$	104
4.2	Perturbation maximale du maillage de l'interface de 5% et 40%.	104
4.3	Cône dans lequel est déplacé le marqueur m_0	105
4.4	Influence de la résolution de la courbure : <i>PDF</i> de l'écart relatif $Err(< \kappa >)$, pour différentes résolutions d_r et une perturbation $p = 5\%$	109
4.5	Influence de la résolution de la courbure : <i>PDF</i> de l'écart relatif $Err(< \kappa >)$, pour différentes résolutions d_r et une perturbation $p = 20\%$	110
4.6	Influence de la perturbation p : <i>PDF</i> de l'écart relatif $Err(< \kappa >)$, pour différentes perturbations p et une résolution de courbure $d_r = 1/20$	111
4.7	Formation de la famille d'ellipsoïdes à partir d'une sphère de résolution $d_{r_0} = 1/16$	115
4.8	Évolution de df_G en fonction du nombre N_c de classes de courbure pour un ellipsoïde de paramètres $d_{r_0} = 1/256$, $p = 0\%$, $\alpha = 140\%$	116
4.9	Représentation des $N_c = 20$ classes de courbures sur un ellipsoïde d'étirement $\alpha = 20\%$ et de résolution de courbure. Dans la figure de droite, un zoom sur une classe de courbure (petit rectangle noir) permet de voir le maillage de l'interface.	116
4.10	Sur-enrichissement de la zone de forte courbure pour un ellipsoïde de paramètre $d_{r_0} = 1/16$, $p = 0\%$ $\alpha = 20\%$	117
4.11	Distribution surfacique df_S (trait continu) et distribution de décompte df_1 (trait discontinu) pour deux stratégies de maillage de l'interface sur un ellipsoïde de paramètres $d_{r_0} = 1/16$, $p = 0\%$, $\alpha = 20\%$	117
4.12	Distribution surfacique df_S pour des ellipsoïdes de paramètres $d_{r_0} = 1/256$, $p = 0\%$, $\alpha \in \{20\%, 80\%, 140\%\}$	119

4.13 Erreurs relatives en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (trait discontinu) sur la courbure κ en fonction de $d_{min} \times \kappa_{max}$ pour des ellipsoïdes de paramètres $p = 0\%$, $\alpha \in \{20\%, 80\%, 140\%\}$	120
4.14 Erreurs relatives en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (trait discontinu) sur la distribution df_S en fonction de $d_{min} \times \kappa_{max}$ pour des ellipsoïdes de paramètres $p = 0\%$, $\alpha \in \{20\%, 80\%, 140\%\}$	121
4.15 Contribution de chaque classe $\hat{\kappa}$ de courbure dans le calcul de $Err^{rel}(df_S)$ pour un ellipsoïde de paramètres $d_{r_0} = 1/256$, $p = 0\%$	122
4.16 Erreurs locales sur la courbure κ (4.16a) et sur la distribution surfacique df_S (4.16b) pour un ellipsoïde de paramètre $p = 0\%$, $\alpha = 20\%$	123
4.17 Erreurs locales sur la courbure κ (4.17a) et sur la distribution surfacique df_S (4.17b) pour un ellipsoïde de paramètre $p = 0\%$, $\alpha = 80\%$	124
4.18 Erreurs locales sur la courbure κ (4.18a) et sur la distribution surfacique df_S (4.18b) pour un ellipsoïde de paramètre $p = 0\%$, $\alpha = 140\%$	125
4.19 Diagramme de Clift [17]	126
4.20 Déformations sinueuses ($p_\phi = 0\%$) appliquées à un ellipsoïde de paramètres $\{d_{r_0} = 1/32, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	128
4.21 Déformation sinueuse ($p_\phi = 25\%$) appliquée à un ellipsoïde de paramètres $\{d_{r_0} = 1/32, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	128
4.22 Déformation variqueuse ($p_\phi = 0\%$) appliquée à un ellipsoïde de paramètres $\{d_{r_0} = 1/32, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	129
4.23 Déformation variqueuse ($p_\phi = 25\%$) appliquée à un ellipsoïde de paramètres $\{d_{r_0} = 1/32, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	129
4.24 Distribution surfacique df_S pour une structure sinueuse de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	130
4.25 Distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ pour une structure sinueuse de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	131
4.26 Comparaison des distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa})$, $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ pour $p_\phi \in \{0\%, 25\%\}$. La structure sinueuse a pour paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	133
4.27 Distribution surfacique df_S pour une structure variqueuse de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	134
4.28 Distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ pour une structure variqueuse de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	135
4.29 Comparaison des distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa})$, $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ pour $p_\phi \in \{0\%, 25\%\}$. La structure variqueuse a pour paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	137
4.30 Comparaison des distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa})$, $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ entre les structures sinueuse et variqueuse avec pour paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	139
4.31 Comparaison des distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa})$, $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ entre les structures sinueuse et variqueuse avec pour paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 25\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$	140
4.32 Bulle 3D issue du cas test 1, à $t = 3$ [2, 51]	141
4.33 Bulle 3D issue du cas test 2, à $t = 1.5$ [2, 51]	141
4.34 Distributions surfaciques de bulles issues des cas tests 1 et 2 de [51].	141
B.1 Vue de profil du stencil 3 et de sa projection sur la sphère de rayon R	151

B.2	Aire utilisée pour construire \mathcal{A}_{mixed} dans le cas d'un triangle obtus.	153
C.1	Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$ with exact transport - $Q < 0$	157
C.2	Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$ with Lagrangian transport - $Q < 0$	158
C.3	Relative errors on κ (a) and \mathbf{n} (b) according to CPU time in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms, $p = 20\%$ - $Q < 0$ and numerical transport.	158
C.4	Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$ with exact transport - $Q > 0$	158
C.5	Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$ with Lagrangian transport - $Q > 0$	159
C.6	Relative errors on κ (a) and \mathbf{n} (b) according to CPU time in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms, $p = 20\%$ - $Q > 0$ and numerical transport.	159
D.1	Subdivision of the discrete mesh in three zones.	161
D.2	Decomposition per zone of the relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ , $p = 0\%$ with exact transport - $Q > 0$	162
D.3	Stencil of the marker where the curvature and normal vector are not well evaluated.	162
D.4	Relative error on κ in function of the angle of rotation θ of the markers $M_i \in$ $(\mathcal{N}_2 \setminus \mathcal{N}_1)$, for the variant "Glimm - \mathcal{N}_{1-1} ". The vertical dash lines are the principal directions.	163
E.1	Evolution de la densité surfacique de courbure pour une famille d'ellipsoïdes de divers étirements.	166
E.2	Erreurs relatives en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (tiret) sur la densité surfacique de courbure d'une famille d'ellipsoïdes, avec la méthode LBO.	169
E.3	Influence de la pondération - Erreurs relatives en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (tiret) sur la densité surfacique de courbure d'une famille d'ellipsoïdes, à perturbation $p = 0\%$, avec la méthode SR- $\mathcal{N}_1-\mathbf{n}_m-0$	170
E.4	Influence de la perturbation - Erreurs relatives en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (tiret) sur la densité surfacique de courbure d'une famille d'ellipsoïdes, à paramètre $N = 1$, avec la méthode SR- $\mathcal{N}_1-\mathbf{n}_m-0$	171

Liste des tableaux

1.1	Exemples d'approximations de la fonction Heaviside [93].	32
4.1	Discrétisation des termes de la distribution $DF_G(\kappa)$	112
4.2	Évolution du nombre $nbsom$ de sommets, $nbele$ d'éléments, de la surface S_{tot} et des courbures κ_{min} et κ_{max} pour les ellipsoïdes d'étirement $\alpha \in \{20\%, 80\%, 140\%\}$ en fonction de la résolution de courbure d_{r_0} de la sphère initiale servant à les engendrer.114	114
4.3	Paramètres physiques et adimensionnels pour les cas tests de [51].	138

Nomenclature

$\Delta\kappa$	Pas de discrétisation de la plage de courbure sur un objet (section 4.2.1, page 112)
$\delta\Omega$	volume de contrôle (section 1.2.2, page 25)
$\partial\Omega$	surface délimitant le volume Ω (section 2.1, page 46)
$\hat{\kappa}$	Classe de courbures comprise entre $\kappa - \Delta\kappa/2$ et $\kappa + \Delta\kappa/2$ (section 4.2.1, page 112)
κ	Courbure moyenne (section 4.2.1, page 112)
Ω	volume à simuler (section 2.1, page 46)
\mathcal{D}	ensemble caractérisant la discrétisation d'une interface 3D (section 2.1, page 46)
\mathcal{E}	ensemble des $N_{\mathcal{E}}$ triangles discrétisant la surface (section 2.1, page 46)
\mathcal{M}	ensemble des $N_{\mathcal{M}}$ marqueurs du maillage lagrangien (section 2.1, page 46)
$\mathcal{N}_{[k,m]}$	k -ème voisinage du marqueur m (section 2.1, page 47)
(\mathcal{P}_e)	plan contenant l'élément e
\mathcal{T}	ensemble des $N_{\mathcal{T}}$ n_e -uplets définissant le sens de parcours des marqueurs (section 2.1, page 46)
\mathcal{V}_e	volume du tétraèdre construit à partir de l'élément e et d'un point de référence
\mathcal{V}	volume de la bulle
$\bar{d}_{e,i}$	vecteur de déplacement du marqueur i de l'élément e pour corriger le volume
$d_{e,i}$	longueur de l'arête i de l'élément e (section 2.1, page 47)
$DF_{\mathbb{1}}(\kappa)$	Distribution de l'occurrence de κ (section 4.2.1, page 112)
$DF_G(\eta)$	Distribution associée à la fonction G et la quantité η (section 4.2.1, page 112)
$DF_S(\kappa)$	Distribution surfacique de courbure (section 4.2.1, page 112)
$e_{[i]}$	voisin de l'élément e par l'arête i (section 2.1, page 47)
G	barycentre des marqueurs de l'interface
h	taille des cellules de la grille eulérienne
i_0	indice du marqueur précédant immédiatement le marqueur i (section 2.1, page 46)
i_2	indice du marqueur suivant immédiatement le marqueur i (section 2.1, page 46)
$m_{[e,i]}$	marqueur i de l'élément e (section 2.1, page 46)
$\bar{n}_{e,i}$	normale unitaire au marqueur i de l'élément e
\bar{n}_{ext}	normale extérieure à la surface $\partial\Omega$ (section 2.1, page 46)
\bar{n}_e	normale unitaire de l'élément e

n_e	nombre de segments ou de marqueurs constituant l'élément e (section 2.1, page 46)
Q_e	qualité de l'élément e
$r_{[e,i]}$	rugosité de l'arête i de l'élément e (section 2.4, page 55)
$\bar{v}_{e,i}$	vitesse du marqueur i de l'élément e (section 2.1, page 46)
$\bar{x}_{e,i}$	coordonnées du marqueur i de l'élément e (section 2.1, page 46)
\bar{x}_G	coordonnées du barycentre G

Chapitre 1

Introduction

Sommaire

1.1	Écoulements diphasiques : diversité et physique multi-échelle	19
1.2	Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques .	22
1.2.1	Modèle 2-fluide	22
1.2.2	Modèle 1-fluide	24
1.2.3	La méthode Volume of Fluid (VOF)	26
1.2.4	La méthode Moment-Of-Fluid (MOF)	27
1.2.5	La méthode Level-Set (LS)	27
1.2.6	La méthode Front-Tracking (FT)	28
1.2.7	Les méthodes mixtes	29
1.3	De l'utilité d'une bonne évaluation des données géométriques de l'interface	30
1.3.1	Formulations des forces de tensions de surface	30
1.3.2	Estimation de la courbure et la normale	32
1.3.3	Exemples de l'utilité des approches de traitement des forces de tension de surface et de l'évaluation de la courbure et la normale	34
1.4	Plan de la thèse	36

1.1 Écoulements diphasiques : diversité et physique multi-échelle

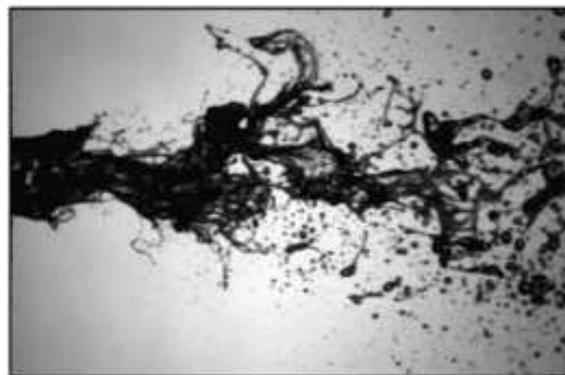
Les écoulements diphasiques à phases séparées se réfèrent aux mouvements de substances de même composition chimique évoluant simultanément dans des phases différentes (eau liquide et vapeur d'eau) ou de nature hétérogène mais se présentant dans des phases similaires (eau liquide et huile) ou distinctes (gasoil et air). Cette description nous fait prendre conscience de la diversité des écoulements diphasiques et de leur présence dans de nombreux domaines, tant au niveau de notre vie quotidienne, de la nature que du monde industriel.

Les échanges entre les océans et l'atmosphère sont un des premiers exemples d'écoulements diphasiques. En effet, notre planète est recouverte à 70% d'eau et les océans constituent la plus grande expérience à ciel ouvert d'écoulements diphasiques. Les phénomènes d'évaporation, le déferlement de vagues et la formation d'un nuage de gouttelettes ou embruns (Fig. 1.1a), le transfert de CO_2 entre les océans et l'atmosphère sont autant de paramètres qui influent sur le climat, la météorologie planétaire et nécessitent encore de nombreuses études [27, 66, 126, 137].

Le déferlement des vagues de l'exemple précédent nous permet d'introduire un autre aspect des écoulements diphasiques qui est l'atomisation de jets. Elle consiste en la fragmentation du jet d'un liquide en des structures de plus en plus petites, allant des ligaments aux gouttes. On assiste à une cascade d'échelles. Le jet initial continu représente les grandes échelles. Il se scinde ensuite en ligaments plus ou moins longs : ces derniers forment l'échelle intermédiaire. Enfin, la



(a) Déferlement de vagues sur des rochers avec formation d'un nuage de fines gouttelettes (embruns).
[\[https://besthqwallpapers.com/fr/download/original/52962\]](https://besthqwallpapers.com/fr/download/original/52962)

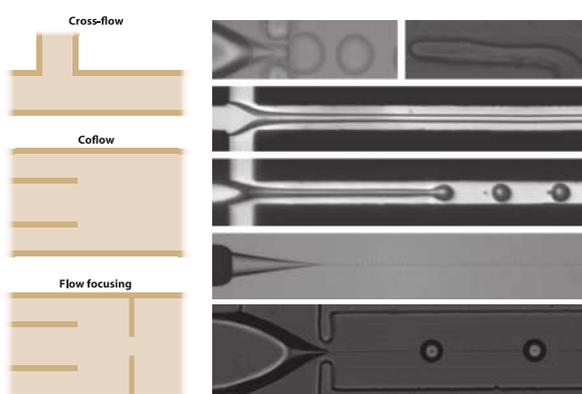


(b) Fragmentation d'un jet. Des ligaments de tailles variés se forment et des gouttes satellitaires apparaissent [70].



(c) Format d'un film liquide avec apparition de digitations après l'impact d'une goutte dans une flaque de lait.

[\[https://publicdomainpictures.net/pictures/50000/velka/dopad-kapky-z-mleka-1.jpg\]](https://publicdomainpictures.net/pictures/50000/velka/dopad-kapky-z-mleka-1.jpg)



(d) Différents modes de génération de gouttelettes. Les dimensions des canaux sont de l'ordre de $10\mu\text{m} - 100\mu\text{m}$ [4].

FIGURE 1.1 – Exemples d'écoulements diphasiques, mettant en jeu différentes échelles.

scission se poursuit et s'achève avec la formation de petites gouttes sphériques qui doivent leur forme à la prédominance des forces de tension de surface (Fig. 1.1b). La collection de gouttes formées lors de la fragmentation du jet s'appelle un spray. Partagée en deux étapes (atomisations primaire et secondaire), elle est le lieu de plusieurs phénomènes physiques (turbulence, instabilités de Kelvin-Helmholtz, Rayleigh-Taylor, Rayleigh-Plateau, vitesse de Taylor-Culick pour le percement d'une nappe liquide) qui influent son évolution. L'ensemble de ces phénomènes est piloté par des nombres adimensionnels comme le nombre de Reynolds Re , le nombre de Weber We , le nombre d'Ohnesorge Oh et également les rapports de quantité de mouvement entre le gaz et le liquide injecté. De nombreux travaux se sont penchés sur les différentes étapes de l'atomisation et les phénomènes physiques impliqués [8, 11, 28, 47, 49, 61, 62, 70, 102]. Nous pouvons citer ainsi FUSTER et al. [35], qui en combinant des approches VOF (Volume Of Fluid) et AMR (adaptive mesh refinement) ont pu identifier deux régimes lors de la retrait d'un film liquide après atomisation qui dépendent du nombre d'Ohnesorge. Outre la compréhension physique de l'atomisation et des paramètres la gouvernant, une manière d'étudier l'atomisation de jet est d'établir la distribution ou PDF (Probability Density Function) des tailles de gouttes constituant le spray, pour ne citer que celle-là. BABINSKY et al. [7] présentent trois approches pour établir la PDF d'un spray : la méthode empirique, la méthode du maximum d'entropie et celle de la fonction de probabilité discrète. Chacune des méthodes est adaptée pour décrire

les différentes étapes de l'atomisation. Dans le livre de LEFEBVRE et al. [63], différentes lois mathématiques de probabilité sont présentées pour modéliser la PDF d'un spray. Ces PDF sont également utiles dans d'autres domaines comme la combustion dans les moteurs, le milieu de la santé, l'agriculture, les industries pharmaceutique et agroalimentaire.

Dans le milieu de la santé, plus particulièrement de la transmission des maladies, connaître les sites d'émissions de gouttelettes générées par l'activité humaine de même que leurs tailles permet de mieux comprendre la propagation de virus aéroportés et par conséquent de mieux les combattre. Dans cette catégorie, nous pouvons citer les travaux de MORAWSKA et al. [78] sur la distribution de tailles de gouttes émises lors d'activités expiratoires humaines.

Dans l'industrie automobile, enrichir les modèles d'atomisation et établir les PDF de tailles de gouttes jouent un rôle primordial dans l'amélioration de l'efficacité des moteurs. En effet, un des points clé est l'optimisation de la surface d'échange entre le carburant et l'air. Avoir la plus grande aire interfaciale favorise la combustion du carburant pour récupérer le maximum d'énergie. Ainsi, dans les travaux de SOM et al. [112], la prise en compte de phénomènes de cavitation et de turbulences dans le jet sortant de l'injecteur lors de l'atomisation primaire permet d'améliorer les résultats des simulations et d'être en concordance avec les données expérimentales. CHEN et al. [16] montrent que différents carburants conduisent à des PDF de taille de gouttes distinctes, mais surtout que l'augmentation de la pression d'injection réduit la taille des gouttes. LUO et al. [68] ont investigué par DNS (Direct Numerical Simulation) la combustion d'un spray de n-heptane et ont montré toute la complexité du phénomène.

Cette cascade d'échelles se retrouve également dans les problèmes d'impacts de gouttes (Fig. 1.1c) ou de génération de gouttelettes dans des microcanaux (Fig. 1.1d). Dans le premier, il est intéressant de déterminer les paramètres influençant l'étalement sur les surfaces d'impact [15, 79, 80, 127, 129]. Dans le second, les phénomènes physiques prédominants ne sont plus les mêmes et le contrôle précis du volume des gouttelettes ainsi engendrées permet dans l'industrie pharmaceutique par exemple de créer de mini-réacteurs pour des synthèses chimiques [4, 111].

Jusqu'ici, nous avons présenté des exemples où la cascade d'échelle s'effectue des grandes échelles aux plus petites. Il existe des situations où cette cascade se passe dans le sens inverse. C'est le cas de la coalescence de gouttes après recouvrement d'une surface par un spray. Ce problème est d'importance dans les domaines agroalimentaires et pharmaceutiques avec les processus dits de séchage de sprays. Ils servent par exemple à la production de poudres initialement mélangées dans un liquide qui est atomisé puis séché par évaporation. L'état des parois sur lesquels le spray peut coalescer avec formation de dépôts, les distributions des tailles de gouttes, les aires interfaciales ont un rôle primordial sur la qualité finale du produit [55, 60, 86]. Nous retrouvons également cette cascade inverse dans les écoulements à bulles dans les conduites (échangeurs, centrales nucléaires). Selon le flux de chaleur échangé entre les parois et le liquide et selon le régime d'écoulement, différents types d'écoulements liquide/vapeur se forment [12]. Un des phénomènes crucial à éviter dans les centrales nucléaires est la crise d'ébullition, premièrement étudiée expérimentalement par NUKIYAMA [82]. Lorsque le flux de chaleur transmis de la surface vers le fluide dépasse une valeur critique appelée Critical Heat Flux (CHF), les bulles générées coalescent et forment un film séparant la surface chauffée du liquide. La chaleur est moins bien évacuée et entraîne la surchauffe de la surface, pouvant engendrer sa détérioration voire sa fusion. Des études sont menées afin de mieux comprendre cette situation et éviter des accidents nucléaires [46, 88].

L'ensemble de ces exemples nous montrent la diversité et la complexité des écoulements diphasiques. Outre les enjeux scientifiques tels que la détermination et la compréhension des phénomènes les gouvernant, il existe également une dimension industrielle à leur étude pour l'obtention de paramètres macroscopiques permettant l'optimisation de systèmes (établissement de PDF, obtention d'aires interfaciales, de vitesse, détection de la forme des objets). Cette richesse et cette complexité se retrouvent également dans les approches développées pour leur

simulation et modélisation.

1.2 Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques

La modélisation et la simulation des écoulements diphasiques demeurent encore un challenge du aux différentes échelles qui coexistent simultanément. Diverses approches existent selon le point de vue choisi. A l'échelle moléculaire, ces sont des modèles dits de dynamique moléculaire qui permettent de passer de l'aspect discontinu de l'écoulement à des grandeurs macroscopiques par des analyses statistiques. A l'échelle macroscopique, le milieu est supposé continu. Les équations locales sont définies sur de petits volumes appelés particule-fluide. Notre travail porte sur ce dernier volet où nous considérons deux fluides non-miscibles. Les équations régissant leur évolution dans le cadre d'interfaces résolues sont abordées dans un premier temps. Puis différentes approches pour modéliser et suivre l'interface sont présentées.

1.2.1 Modèle 2-fluide

Les équations de Navier-Stokes sont les relations qui permettent de suivre l'évolution de grandeurs physiques (masse volumique, quantité de mouvement, température, énergie) pour les écoulements fluides. Dans un écoulement diphasique où deux phases sont mises en jeu, une manière naturelle de décrire leur évolution est la résolution dans chaque phase des équations de Navier-Stokes. Nous ne considérons que l'évolution isotherme d'écoulements diphasiques. Ainsi, pour chaque phase k , nous résolvons les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement, respectivement présentées dans les relations (1.1) et (1.2); ρ_k correspond à la masse volumique, μ_k la viscosité dynamique, \mathbf{u}_k la vitesse et τ_k le tenseur des contraintes associés à la phase k .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k) = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \mathbf{u}_k) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) = \rho_k \mathbf{g} + \nabla \cdot \tau_k \quad (1.2)$$

Le tenseur des contraintes est donné par la relation (1.3).

$$\tau_k = -p_k \mathbb{I} + \tau'_k \quad (1.3)$$

Le tenseur \mathbb{I} est la matrice identité, p_k la pression et τ'_k est le tenseur des contraintes visqueuses. Pour un fluide newtonien, il s'exprime suivant la relation (1.4).

$$\tau'_k = 2\mu_k S_k - \frac{2}{3}\mu_k (\nabla \cdot \mathbf{u}_k) \mathbb{I} \quad (1.4)$$

S_k est le tenseur des taux de déformations et est donné par la relation (1.5).

$$S_k = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u}_k + (\nabla \mathbf{u}_k)^t \right) \quad (1.5)$$

Dans le cas d'écoulements incompressibles ($\nabla \cdot \mathbf{u}_k = 0$), le tenseur de contraintes visqueuses τ'_k est simplifié pour aboutir à la relation (1.6).

$$\tau'_k = \mu_k \left(\nabla \mathbf{u}_k + (\nabla \mathbf{u}_k)^t \right) \quad (1.6)$$

Au niveau de l'interface entre les phases, un raccord est effectué à travers les relations de saut développées par DELHAYE [21]. Les équations (1.7) et (1.8) représentent respectivement les relations de saut de vitesses (ou continuité de la vitesse dans le cas $\dot{m}_i = 0$) et de saut de contraintes.

$$[\rho_k(\mathbf{u}_k - \mathbf{V}_i)] \cdot \mathbf{n} = \dot{m}_i \quad (1.7)$$

$$[-\dot{m}_k \mathbf{u}_k + \tau_k \cdot \mathbf{n}_k] = \sigma \kappa \mathbf{n} + \nabla \sigma \quad (1.8)$$

L'opérateur $[\bullet]$ dans les relations (1.7) et (1.8) est une différence effectuée dans le sens de la normale \mathbf{n} , avec \mathbf{n}_k la normale à l'interface pointant à l'extérieur de la phase k . Ainsi si $\mathbf{n} = \mathbf{n}_1$, la différence est effectuée de la phase 1 vers la phase 2 (et inversement) ; σ correspond au coefficient de tension de surface et κ au double de la courbure moyenne, \mathbf{V}_i est la vitesse de l'interface, \dot{m}_k le flux de masse de la phase k à l'interface, \dot{m}_i la génération de masse à l'interface (1.9).

$$\sum_{k=1}^2 \dot{m}_k = \dot{m}_i \quad \text{avec} \quad \dot{m}_k = \rho_k(\mathbf{u}_k - \mathbf{V}_i) \cdot \mathbf{n}_k \quad (1.9)$$

L'interface étant sans épaisseur et sans masse, le terme \dot{m}_i est nul en absence de changement de phase.

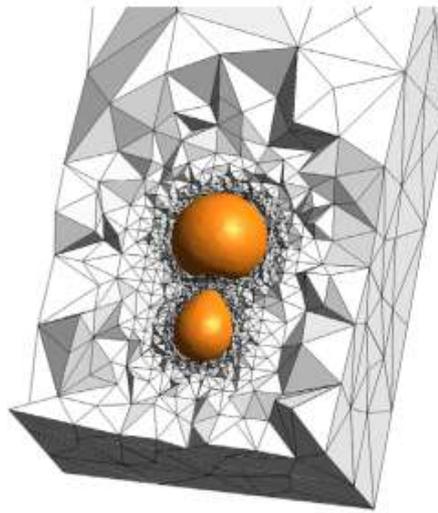


FIGURE 1.2 – Coalescence de deux bulles [18].

Cette approche de l'étude des écoulements diphasiques est beaucoup employée avec la méthode Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) [18, 20, 36, 37, 38, 64]. Un exemple est donné sur la figure 1.2 qui illustre la coalescence de deux bulles. La méthode ALE consiste à modéliser le milieu fluide par un maillage non-structuré qui se déforme et s'adapte au cours de l'évolution de l'interface. Elle a l'avantage de capter et s'adapter à des géométries complexes. Toutefois, le revers de la médaille se situe dans son coût numérique élevé. En effet, à chaque itération temporelle de la simulation, le maillage est de nouveau généré. Réaliser cette opération en trois dimensions d'espace pour des configurations complexes de rupture ou de coalescence d'interface n'est en général pas possible.

1.2.2 Modèle 1-fluide

L'idée est d'avoir un seul jeu d'équations qui rend compte de l'évolution des deux fluides. Le formalisme du modèle 1-fluide a été introduit par KATAOKA [54] dans les années 80. Le lecteur est également orienté vers [69] pour une démarche détaillée de la démonstration. Dans un premier temps, le maillage non-structuré du domaine de simulation est abandonné pour laisser place à un maillage structuré sur lequel sont résolues les équations de Navier-Stokes. Pour mettre en place cet unique système d'équations décrivant l'évolution des deux fluides, Kataoka introduit une fonction caractéristique $\phi_k(\bar{x}, t)$ associée à la phase k . Elle prend la valeur 1 quand le point \bar{x} où elle est évaluée se situe dans la phase k . Dans le cas contraire, elle est nulle (1.10).

$$\phi_k(\bar{x}, t) = \begin{cases} 1, & \bar{x} \in \text{phase } k \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.10)$$

Par ailleurs, la fonction ϕ possède d'autres propriétés indiquées dans les relations (1.11), (1.12) et (1.13).

$$\forall \bar{x}, \forall t, \quad \sum_{k=1}^2 \phi_k(\bar{x}, t) = 1 \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi_k) + \mathbf{V}_i \cdot \nabla \phi_k = 0 \quad (1.12)$$

$$\nabla \phi_k = -\mathbf{n}_k \delta_i \quad (1.13)$$

Le vecteur \mathbf{n}_k est la normale à l'interface pointant à l'extérieur de la phase k et δ_i est la fonction de Dirac localisée au niveau de l'interface. En effet, la fonction ϕ_k est discontinue à l'interface, passant de la valeur 1 à 0. Sa dérivée est donc un Dirac centré à l'interface entre les deux phases. Par ailleurs la variation est dans la direction de la normale à l'interface. La première étape pour aboutir à une formulation 1-fluide dans le cadre d'écoulements incompressibles ($\nabla \cdot \mathbf{u}_k = 0$) est la multiplication par ϕ_k des équations de conservation (1.1) (1.2) et leur sommation sur l'ensemble des phases. Par la suite, l'utilisation des relations de saut (1.7) (1.8) avec l'hypothèse $\dot{m}_i = 0$ et des propriétés de ϕ_k (1.11) (1.12) (1.13) permet une simplification des expressions et l'aboutissement à une formulation des équations de conservation incluant les relations de saut par la présence des forces de tension de surface (1.14) à (1.17).

$$\nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^2 \phi_k \mathbf{u}_k \right) + \left(\sum_{k=1}^2 \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k \right) \delta_i = 0 \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{k=1}^2 \phi_k \rho_k \right) + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^2 \phi_k \rho_k \mathbf{u}_k \right) = 0 \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{k=1}^2 \phi_k \mu_k \right) + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^2 \phi_k \mu_k \mathbf{u}_k \right) = - \left(\sum_{k=1}^2 \phi_k \mu_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{V}_i) \cdot \mathbf{n}_k \right) \delta_i \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{k=1}^2 \phi_k \rho_k \mathbf{u}_k \right) + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^2 \phi_k \rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k \right) = \sum_{k=1}^2 \phi_k \rho_k \mathbf{g} + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^2 \phi_k \boldsymbol{\tau}_k \right) + \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_i \quad (1.17)$$

La dernière étape consiste à effectuer un filtrage spatial car les équations (1.15) (1.17) comportent des discontinuités introduites par la fonction caractéristique ϕ_k . Ce filtrage permet de travailler avec des grandeurs continues. Ainsi, un filtre spatial G est introduit et remplit la condition (1.18).

$$\int_{\delta\Omega} G(\bar{x} - \bar{x}') d\bar{x}' = 1 \quad (1.18)$$

Calculé sur un volume de contrôle $\delta\Omega$ (généralement la maille de la grille de discrétisation spatiale), il est appliqué à la fonction ϕ_k pour donner sa contrepartie filtrée C_k (1.19), et également à toute autre grandeur Ψ_k du problème (1.20), avec $\Psi_k \in \{\rho_k, \mu_k, \mathbf{u}_k, \tau_k\}$. La fonction filtrée C_k correspond à la fraction volumique de la phase k dans le volume de contrôle $\delta\Omega$.

$$C_k(\bar{x}, t) = \int_{\delta\Omega} \phi_k(\bar{x}', t) G(\bar{x} - \bar{x}') d\bar{x}' \quad (1.19)$$

$$C_k \langle \Psi_k \rangle (\bar{x}, t) = \int_{\delta\Omega} \Psi_k(\bar{x}', t) \phi_k(\bar{x}', t) G(\bar{x} - \bar{x}') d\bar{x}' \quad (1.20)$$

On définit également la moyenne $\Psi \in \{\rho, \mu, \mathbf{u}, \tau\}$ des grandeurs filtrées (1.21).

$$\Psi = \sum_{k=1}^2 C_k \langle \Psi_k \rangle \quad (1.21)$$

A ce stade, des hypothèses doivent être émises, dont les deux premières sont fondamentales.

- L'absence de changement de phase.
- L'absence de glissement entre les phases. Cela se traduit par le fait que $\langle \mathbf{u}_1 \rangle = \langle \mathbf{u}_2 \rangle$.
- Négligence des corrélations des fluctuations de vitesse qui peuvent exister à une échelle plus petite que celle du filtrage spatial : $\langle \mathbf{u}_1 \otimes \mathbf{u}_1 \rangle = \langle \mathbf{u}_2 \otimes \mathbf{u}_2 \rangle$.
- En moyenne (au sens du filtrage), les gradients sont les mêmes en un point donné, quelle que soit la phase : $\langle S_1 \rangle = \langle S_2 \rangle$.

L'emploi de ces hypothèses avec l'application du filtre aux équations (1.16) et (1.17) nous donne finalement la formulation 1-fluide pour des écoulements diphasiques (1.22) (1.23).

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \tau + \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_i \quad (1.23)$$

A cela, il faut ajouter l'équation d'advection de la fonction C_k (1.24).

$$\frac{\partial}{\partial t}(C_k) + \mathbf{u} \cdot \nabla C_k = 0 \quad (1.24)$$

Le terme $\sigma\kappa\mathbf{n}\delta_i$ représente la contribution des tensions de surface dont les paramètres κ et \mathbf{n} dépendent des propriétés géométriques de l'interface. Dans la formulation 1-fluide, ils sont donnés par la relation (1.25).

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} \quad \text{avec} \quad \mathbf{n} = \nabla C_k / \|\nabla C_k\| \quad \text{et} \quad \mathbf{n}\delta_i = \nabla C_k \quad (1.25)$$

Quel que soit le modèle utilisé (1-fluide ou 2-fluides) pour la simulation des écoulements diphasiques, l'évaluation de la courbure κ et de la normale à l'interface \mathbf{n} est importante pour la prise en compte des forces de tensions de surface. Elles dépendent de l'interface dont la modélisation regroupe diverses approches. On distingue ainsi les approches dites de capture d'interface qui accèdent à la position de l'interface de manière implicite. Elles font face aux approches dites de suivi d'interface qui ont la connaissance explicite de celle-ci. La section suivante est consacrée à une présentation non exhaustive de ces méthodes.

1.2.3 La méthode Volume of Fluid (VOF)

Elle fait partie des méthodes dites de capture d'interface et fut introduite par HIRT et al. [50]. La position de l'interface se déduit implicitement à partir d'une fonction couleur C . Dans une maille de la grille du domaine discrétisé, elle représente la fraction volumique de la phase à laquelle elle est associée. Ainsi, la couleur C_k associée à la phase k vaut 1 à l'intérieur de la phase k , 0 à l'extérieur et une valeur intermédiaire au niveau de l'interface. L'évolution de l'interface est captée par l'équation d'advection de la fonction couleur C_k (1.26). On retrouve une forme conservative lorsque l'écoulement est incompressible ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$).

$$\frac{\partial}{\partial t}(C_k) + \nabla \cdot (\mathbf{u}C_k) - C_k \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.26)$$

La résolution numérique de cette équation pose toutefois des problèmes de diffusion de l'interface et de lissage des propriétés physiques à son voisinage à cause de la discontinuité de la fonction C_k . La résolution de ce problème s'effectue par une double approche.

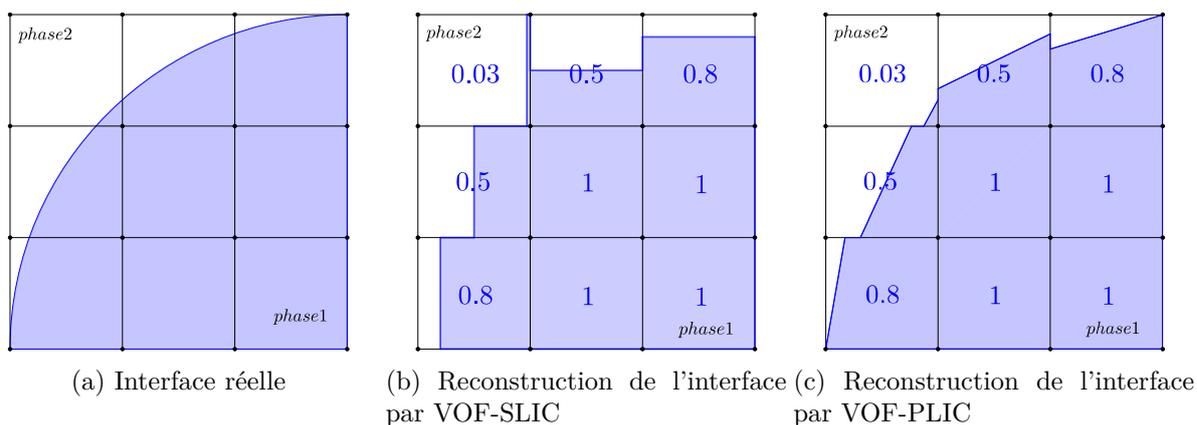


FIGURE 1.3 – Différents méthodes de reconstruction de l'interface à partir de la fonction couleur C_k issue de modélisation VOF.

La première consiste à chaque fois à reconstruire l'interface avant son advection. Pour ce faire, différentes techniques ont été développées. Des exemples sont présentés sur la figure 1.3. La méthode SLIC (Simple Line Interface Calculation) introduite par [81] représente l'interface par des segments parallèles à la grille eulérienne. La position et l'orientation des segments dépend des couleurs C_k dans un bloc 3×1 centré autour de la cellule d'intérêt (Fig. 1.3b). Une amélioration à la représentation de l'interface a été apportée par YOUNGS [135] avec la méthode PLIC

(Piecewise Linear Interface Calculation). Dans chaque cellule où se situe l'interface, celle-ci est toujours approximée par une droite dont l'orientation est ici déterminée par une approximation de la normale à l'interface. Des discontinuités subsistent cependant entre les interfaces reconstruites de cellules adjacentes (Fig. 1.3c). Dans le cadre de méthodes d'ordre élevé, nous pouvons citer les méthodes LVIRA (Least-squares Volume-of-fluid Interface Reconstruction Algorithm) de PUCKETT [96] et son amélioration ELVIRA (E pour Efficient) de PILLIOD [89] qui sont du second ordre. Dans la première, la pente du segment d'interface (ou la normale) est évaluée en minimisant une erreur (L_1 , L_2 ou L_∞ au choix de l'utilisateur) entre la fonction C_k et une approximation \tilde{C}_k de cette dernière. L'amélioration apportée par la méthode ELVIRA consiste à augmenter le choix possible de pentes (6 en 2D) en considérant en plus les différences finies décentrées amont et aval pour le calcul de gradient de C_k . La minimisation est ensuite opérée sur ces différents candidats et la pente retenue est celle qui présente le minimum d'erreurs. Le lecteur est orienté vers [90] pour une description plus détaillée des méthodes présentées auparavant. SCARDOVELLI et al. [103] pour sa part propose, en plus d'une approximation linéaire, une approximation quadratique de l'interface, permettant de la représenter par une succession de deux segments. Plus récemment, [5] propose une alternative dans le cadre de la méthode PLIC pour reconstruire l'interface, pouvant s'avérer jusqu'à 100 fois plus rapide. Nommée NPLIC (Neural Piecewise Linear Interface Calculation), elle utilise un réseau de neurones pour trouver l'orientation et la position de l'interface.

La seconde approche se focalise sur les schémas de discrétisation de l'équation d'advection (1.26). SCARDOVELLI et al. [103] propose ainsi un schéma mixte d'advection EI-LE (Eulerian Implicit - Lagrangian Explicite) qui combiné à leur méthode de reconstruction d'interface donnent de meilleurs résultats que des approches VOF-PLIC. Une version 3D est présentée dans [6]. D'autres approches par contre ne passent pas par une reconstruction de l'interface. Dans la méthode THINC (Tangent of Hyperbola for INterface Capturing) de XIAO et al. [130], le saut introduit par la fonction caractéristique C_k est modélisé par une tangente hyperbolique, permettant le calcul de manière algébrique des flux dans la relation (1.26). Une amélioration en est proposée par [131].

Un des grands avantages de la méthode VOF est la conservation de volume lors des simulations. Elle permet également de gérer automatiquement les phénomènes de coalescence et de rupture. Toutefois, les évaluations des propriétés de l'interface, à savoir la courbure κ et la normale \mathbf{n} demeurent de faible qualité ou complexes (exemple avec la méthode Smooth VOF de [48]).

1.2.4 La méthode Moment-Of-Fluid (MOF)

Introduite en 2005 par DYADECHKO et al. [29], la méthode MOF (Moment-Of-Fluid) se veut plus précise et d'ordre supérieure (ordre 2 de convergence) à la méthode VOF [3, 58]. En plus de la fonction couleur C_k qui est transportée, son centroïde est également transporté. Par ailleurs, contrairement à la méthode VOF qui nécessite l'information des cellules adjacentes pour la reconstruction de l'interface, elle utilise uniquement l'information de la cellule eulérienne concernée. Un des avantages de cette méthode est également d'arriver à représenter des éléments sous-maille comme les ligaments [52]. Bien que l'approche MOF puisse traiter d'écoulements multi-matériaux (supérieur à 2), elle peut devenir coûteuse numériquement. En ce sens récemment, il est proposé une alternative qui permet d'améliorer les performances numériques de la méthode [19].

1.2.5 La méthode Level-Set (LS)

L'idée derrière la méthode Level-Set (LS) est de pouvoir accéder facilement et avec précision aux propriétés de l'interface $\partial\Omega$, à savoir la courbure κ et la normale \mathbf{n} . Introduite par OSHER

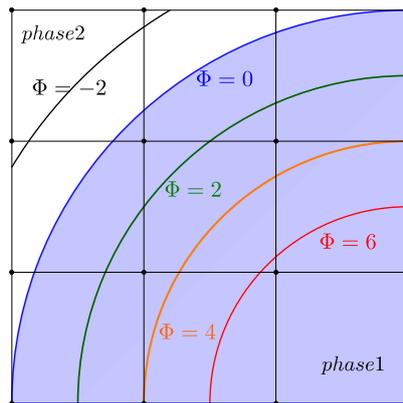


FIGURE 1.4 – Isosurfaces de la fonction Level-set Φ . L'interface est située à $\Phi = 0$. Le signe de Φ permet de connaître la phase où on se situe.

et al. [85], elle fait partie des méthodes de capture d'interface car la position de l'interface est connue de manière implicite à travers une fonction Φ . Cette dernière est une distance signée d'un point $\bar{x} \in \Omega$ à l'interface $\partial\Omega$. Elle prend la valeur 0 au niveau de l'interface et son signe positif ou négatif détermine la phase dans laquelle on se situe (Fig. 1.4). Ainsi, la fonction $\Phi(\bar{x}, t)$ peut être définie par la relation (1.27).

$$\Phi(\bar{x}, t) \begin{cases} = 0, & \bar{x} \in \partial\Omega \\ > 0, & \bar{x} \in \text{phase 1} \\ < 0, & \bar{x} \in \text{phase 2} \end{cases} \quad (1.27)$$

L'évolution de l'interface s'effectue grâce à l'advection de la fonction Φ (1.28).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Phi) + \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi = 0 \quad (1.28)$$

La résolution numérique de l'équation (1.28) pose certains problèmes car au cours de sa résolution, il n'y a aucune garantie que la fonction Φ demeure une fonction distance signée. Pour y remédier, SUSSMAN et al. [115] proposent une procédure de réinitialisation de la fonction Φ après chaque advection. Par la suite, OLSSON et al. [83] [84] apportent une amélioration à cette réinitialisation et en profite pour proposer une approche conservative CLS (Conservative Level-Set). En effet, contrairement à la méthode VOF, la méthode LS peine à conserver le volume. Concernant les schémas de discrétisation des équations d'advection et de réinitialisation de la fonction Φ , nous guidons le lecteur vers les travaux de [39] pour plus de détails. Mise à part les difficultés pour conserver le volume, la méthode LS gère aisément les changements topologiques de l'interface et accède facilement à la courbure κ et la normale \mathbf{n} par les relations (1.29).

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} \quad \text{avec} \quad \mathbf{n} = \nabla \Phi / \|\nabla \Phi\| \quad (1.29)$$

1.2.6 La méthode Front-Tracking (FT)

L'approche Front-Tracking (FT), dans la catégorie des méthodes de suivi d'interface, offre la connaissance explicite de la position de l'interface. En effet, en plus de la grille eulérienne fixe pour la résolution des équations de conservation, elle dispose d'un maillage distinct dédié à l'interface. La figure 1.5 en donne une illustration. Les premiers travaux sur la méthode FT remontent à [40, 43, 53, 124]. L'évolution de l'interface se fait à travers le transport lagrangien des

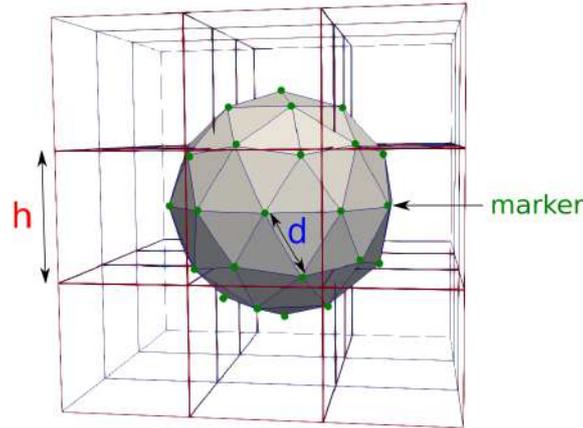


FIGURE 1.5 – Bulle/goutte modélisée par la méthode Front-Tracking (FT). Des marqueurs recouvrent la surface et forment des triangles dont la taille moyenne des arêtes est d . La grille eulérienne a une résolution d'espace h .

points ou marqueurs de l'interface connaissant la vitesse de cette dernière. Ainsi pour un marqueur $m \in \partial\Omega$ de l'interface et de coordonnées \bar{x}_m , son mouvement est régi par l'équation (1.30), avec \mathbf{V}_i la vitesse de l'interface.

$$\frac{d}{dt}(\bar{x}_m) = \mathbf{V}_i \quad (1.30)$$

Lors de leur mouvement, les marqueurs du maillage de l'interface peuvent s'éloigner ou se rapprocher, conduisant à une mauvaise représentation de l'interface si rien n'est fait. Pour ce faire, tout un ensemble de procédures de gestion du maillage de l'interface doivent être mis en place. Des procédures pour les phénomènes de coalescence ou de rupture doivent être également prises en compte car l'approche FT ne gère pas automatiquement ces processus. Deux philosophies existent quant à la gestion des marqueurs de l'interface. D'un côté, il y a l'approche où les marqueurs de l'interface sont connectés entre eux. Nous pouvons citer dans cette catégorie les travaux de [26, 42, 122]. De l'autre côté, TORRES et al. [120] introduisent la méthode PSM (Point-Set Method). Nous avons également la méthode LCRM (Level Contour Reconstruction Method) développée par SHIN et al. [108] [107]. Une amélioration, la méthode LFRM (Local Front Reconstruction Method), en est proposée par [110]. Bien que la méthode FT a l'avantage de connaître explicitement la position de l'interface et d'en déduire ses propriétés géométriques grâce à la géométrie différentielle, elle a l'inconvénient de ne pas conserver le volume. GLIMM et al. [41] se sont penchés sur ce problème et proposent une approche conservative pour la méthode FT.

1.2.7 Les méthodes mixtes

Les différentes approches précédemment présentées possèdent toutes leurs avantages et leurs inconvénients. Les méthodes VOF, MOF et LS gèrent automatiquement la coalescence et la rupture mais moyennent la connaissance de l'interface à l'intérieur d'une maille eulérienne, ce qui n'est pas le cas de la méthode FT. La conservation de la masse est assurée pour les méthodes VOF et MOF alors que les approches LS et FT ne conservent pas la masse. Ces dernières offrent de meilleurs résultats dans l'évaluation des propriétés géométriques de l'interface, contrairement aux approches VOF et MOF. Au vu de ces éléments, différents auteurs choisissent de combiner les méthodes entre elles afin de profiter des avantages de chacune d'entre elles. Ainsi, SUSSMAN

et al. [114] proposent le couplage entre LS et VOF avec la méthode CLSVOF (Coupled Level-Set/Volume-Of-Fluid) dans l'idée d'améliorer la conservation de la masse et de mieux évaluer les tensions de surfaces. MÉNARD et al. [75] [62] utilisent une approche LS/VOF/GFM (Ghost Fluid Method par [34]) pour investiguer l'atomisation primaire d'un jet liquide. SUN et al. [113] développent une version simplifiée du couplage VOF/LS, appelée VOSET, où le calcul de la fonction LS se fait au moyen d'un processus géométrique itératif. La méthode LCRM introduite TORRES et al. [120] est une combinaison des méthodes FT et LS.

1.3 De l'utilité d'une bonne évaluation des données géométriques de l'interface

Différentes méthodes pour modéliser l'interface et son évolution au cours du temps ont été présentées. Que ce soit par le transport d'une fraction volumique, d'une fonction distance ou de marqueurs positionnés à sur l'interface, chacune de ces approches possède ses avantages et ses inconvénients. Toutefois, elles doivent toutes faire le lien entre la représentation qu'elles ont de l'interface et ses propriétés géométriques, à savoir la courbure κ et la normale \mathbf{n} . En effet, ces éléments sont les principaux facteurs définissant les forces de tension de surface qui différencient un écoulement monophasique d'un écoulement diphasique. Par conséquent, une bonne modélisation et évaluation des forces de tension de surface, et par extension de la courbure et de la normale, semble crucial dans la simulation d'écoulements diphasiques. De même qu'il existe une multiplicité dans la modélisation de l'interface, une grande variété de méthodes d'évaluation des courbures et normales de l'interface a été développée au cours des années. Après avoir présenté les formulations employées pour décrire les forces de tension de surface dans les équations de conservation, quelques approches pour évaluer la courbure et la normale sont exposées. Elles font par la suite place à des exemples illustrant l'importance du traitement à accorder à l'évaluation de la courbure et de la normale.

1.3.1 Formulations des forces de tensions de surface

Dans le modèle 2-fluide, les forces de tensions de surface apparaissent dans les relations de saut de contraintes (1.8) ou dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement pour le modèle 1-fluide (1.23). Dans cette dernière, la force de tension de surface par unité de volume est donnée par le terme $\mathbf{f}_\sigma = \sigma\kappa\mathbf{n}\delta_i$. Intégrée sur un volume de contrôle $\delta\Omega$, la force de tension de surface \mathbf{F}_σ s'exprime par la relation (1.31).

$$\mathbf{F}_\sigma = \int_{\delta\Omega} \mathbf{f}_\sigma d\mathcal{V} \quad \text{avec} \quad \mathbf{f}_\sigma = \sigma\kappa\mathbf{n}\delta_i \quad (1.31)$$

A partir de cette relation, deux formulations sont possibles.

- **Une approche surfacique** : la force de tension de surface agissant sur l'interface uniquement, l'approche naturelle est de l'exprimer à cet endroit. La distribution de Dirac δ_i joue ce rôle car elle est uniquement non-nulle sur l'interface et permet ainsi de transformer la relation volumique (1.31) en une intégrale de surface (1.32). La surface de l'interface est notée S .

$$\mathbf{F}_\sigma = \int_S \sigma\kappa\mathbf{n} dS \quad (1.32)$$

A ce stade, la force de tension de surface \mathbf{F}_σ est évaluée soit géométriquement en utilisant les relations de Frenet [122], soit par un calcul direct [117]. En effet, dans le premier cas,

les relations de Frenet (en 2D) lient entre elles la courbure κ , la normale \mathbf{n} , la tangente \mathbf{t} et la variation $d\mathcal{S}$ sur une ligne courbe (1.33).

$$d\mathbf{t} = \kappa n d\mathcal{S} \quad \text{et} \quad d\mathbf{n} = -\kappa t d\mathcal{S} \quad (1.33)$$

En considérant dans le cas 2D un contour Γ délimité par les points A et B , la force de tension de surface est donné simplement par la relation (1.34).

$$\mathbf{F}_\sigma = \int_{\Gamma} \sigma d\mathbf{t} = \sigma_B \mathbf{t}_B - \sigma_A \mathbf{t}_A \quad (1.34)$$

Ainsi la force de tension de surface s'obtient simplement par le calcul des tangentes à la surface. Dans le cas 3D, le terme $\kappa \mathbf{n}$ est plutôt remplacé par $(\mathbf{n} \times \nabla) \times \mathbf{n}$ (démonstration dans [123]) et permet d'aboutir grâce au théorème de Stokes à la relation (1.35).

$$\mathbf{F}_\sigma = \int_S \sigma \mathbf{t} \times \mathbf{n} d\mathcal{S} \quad (1.35)$$

Comme les équations de conservation sont résolues sur une grille fixe eulérienne, certaines approches transfèrent les informations de la surface vers la grille eulérienne et/ou vice-versa. TRYGGVASON et al. [122] utilisent ainsi des fonctions de PESKIN [87] pour interpoler les forces de tension de surface sur la grille eulérienne.

- **Une approche volumique** : Un des éléments principaux dans l'approche volumique est le fait que la fonction Dirac δ_i est la dérivée au sens des distributions de la fonction Heaviside H . La force de tension de surface (1.31) se réécrit donc pour donner la relation (1.36).

$$\mathbf{F}_\sigma = \int_{\delta\Omega} \mathbf{f}_\sigma d\mathcal{V} \quad \text{avec} \quad \mathbf{f}_\sigma = \sigma \kappa \nabla H \quad (1.36)$$

L'étape suivante consiste à trouver une approximation H_ϵ de la fonction Heaviside. Le paramètre ϵ correspond à l'épaisseur donnée à l'interface. Aussi, lorsque ϵ tend vers 0, la fonction Heaviside est retrouvée (1.37)

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} H_\epsilon = H \quad (1.37)$$

Le tableau 1.1 donne quelques exemples d'approximations de la fonction Heaviside [93]. Ainsi dans une modélisation VOF de l'interface, la fonction couleur C est utilisée comme une approximation de la fonction Heaviside. Cela s'apparente à une approche Continuum Surface Force (CSF) de BRACKBILL et al. [10] où l'épaisseur de l'interface est de l'ordre de la maille de la grille eulérienne. Dans une approche Level-Set, l'approximation H_ϵ est construite à partir de la fonction distance signée Φ .

Ces différentes approches sont plus au moins adaptées à la modélisation choisie pour décrire l'interface. Ainsi pour une modélisation VOF ou LS, l'approche volumique est plus naturelle car la construction de l'approximation de la fonction Heaviside est aisée grâce à l'utilisation de la fonction couleur C (VOF) ou la fonction distance signée Φ (LS). La modélisation FT permettant l'accès direct à la position de l'interface est plus encline à une approche surfacique. Toutefois cela

Méthode	Fonction H_ϵ
CSF (VOF)	C
smooth (Level-Set/Front-Tracking)	$\begin{cases} 0 & , \Phi < -\epsilon \\ 1 & , \Phi > +\epsilon \\ (1 + \Phi/\epsilon + \sin(\pi\Phi/\epsilon)/\pi) / 2 & , \text{sinon} \end{cases}$
GFM (Level-Set/VOF)	$\begin{cases} 1 & \text{si } \Phi > 1 \text{ (Level-Set) ou } C > 0.5 \text{ (VOF)} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$

TABLE 1.1 – Exemples d'approximations de la fonction Heaviside [93].

n'empêche pas de combiner les approches surfacique et volumique entre elles. Ainsi SHIN et al. [107] proposent une approche hybride dans laquelle la force volumique \mathbf{f}_σ de tension de surface est exprimée dans une approche volumique avec une courbure calculée à partir d'une formulation surfacique. Plus de détails sur les calculs pour cette formulation hybride sont données dans [106, 109].

Par ailleurs, une attention particulière doit être apportée lors de la discrétisation des termes de tensions de surface et de gradient de pression. En effet, dans le cas d'une bulle/goutte statique ($\mathbf{u} = 0$) ou en translation ($\mathbf{u} = \text{cste}$) et en l'absence de gravité, les termes de tensions de surface équilibrent le gradient de pression (1.38).

$$-\nabla p + \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_i = -\nabla p + \sigma \kappa \nabla H = 0 \quad (1.38)$$

Par conséquent, afin d'assurer cet équilibre, les schémas de discrétisation de la pression et des forces de tension de surface (ou de la fonction Heaviside) doivent être consistants et la courbure doit rester constante sur cette sphère. La rupture de cet équilibre conduit à l'apparition des courants parasites.

Quelle que soit l'approche employée pour formuler les forces de tensions de surface, il n'en demeure pas moins que la courbure κ et la normale \mathbf{n} à l'interface doivent être évaluées.

1.3.2 Estimation de la courbure et la normale

La courbure κ et la normale \mathbf{n} sont des propriétés géométriques de l'interface et interviennent dans le calcul des forces de tensions de surface. On peut ainsi distinguer les méthodes utilisant l'information implicite de l'interface pour en déduire ses propriétés et celles qui se basent sur des éléments de géométrie différentielles car elles ont accès à la position explicite de la surface.

Une des méthodes les plus classiques d'évaluation de la courbure et la normale à l'interface est la méthode Continuum Surface Force (CSF). Elle fut introduite par BRACKBILL et al. [10] dans le cadre de la méthode VOF. La fonction couleur C (ou une version lissée \tilde{C}) est utilisée pour évaluer la courbure et la normale (1.39)

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} \quad \text{avec} \quad \mathbf{n} = \nabla C / \|\nabla C\| \quad (1.39)$$

Cependant avec cette formulation, les erreurs sur la courbure κ tendent à augmenter avec la résolution spatiale. Bien que initialement développée dans le cadre de la méthode VOF, l'approche CSF peut se décliner à toute autre méthode de modélisation de l'interface, du moment où une fonction caractéristique peut être construite.

Une alternative est la méthode Continuous Surface Stress (CSS) de SCARDOVELLI et al. [104]. Elle permet de calculer les forces de tension de surface sans passer par l'évaluation de la courbure. Elle introduit le tenseur T défini par la relation (1.40).

$$T = -\sigma (\mathbb{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \delta_i \quad (1.40)$$

avec \mathbb{I} la matrice identité. La normale \mathbf{n} est évaluée de la même manière que dans la relation (1.39) et à partir d'une fonction couleur lissée \tilde{C} . La force de tension de surface \mathbf{f}_σ est calculée grâce à la relation (1.41).

$$\mathbf{f}_\sigma = \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_i = -\nabla \cdot T \quad (1.41)$$

On aboutit ainsi à une formulation conservative des forces de tension de surface.

Toujours dans le cadre de la modélisation VOF, la courbure peut être évaluée avec précision en construisant une fonction hauteur $y = f_y(x)$. La courbure κ est calculée facilement grâce à l'équation (1.42).

$$\kappa = \frac{f_y''}{\left(1 + (f_y')^2\right)^{3/2}} \quad (1.42)$$

La fonction hauteur $y = f(x)$ se construit en sommant dans une direction les valeurs de la fonction couleur C . Si ce choix de construction ne convient pas, l'orientation peut être changer pour construire cette fois la fonction hauteur dans l'autre direction $x = f_x(y)$. Afin de gagner en précision sur l'évaluation de κ , il suffit dans l'équation (1.42) de choisir des discrétisations d'ordre élevé pour le calcul des dérivées de la fonction hauteur f_y .

En ce qui concerne la modélisation FT, la connaissance explicite de la position de l'interface permet l'usage d'éléments de géométrie différentielle pour estimer avec précision les courbures et les normales de l'interface. Ainsi, MEYER et al. [76] utilise l'opérateur de Laplace-Beltrami pour évaluer la courbure et la normale sur un maillage de triangles. Cet opérateur qui est un laplacien surfacique, est appliqué à un point $\bar{x} \in \partial\Omega$ de l'interface puis intégré sur une région autour de ce point. La direction du vecteur résultant fournit celle de la normale et son intensité est liée à la courbure. La connaissance explicite de la position de l'interface permet également d'en construire une équation. L'approche locale est la plus commune [26]. L'approximation locale de la surface est établie généralement en minimisant un résidu rms dont la forme est donnée par la relation (1.43).

$$rms = \sum_k \omega_k (\bar{x}_k \cdot \mathbf{M} \bar{x}_k + \mathbf{n} \cdot \bar{x}_k + b)^2 \quad \text{et} \quad \nabla(rms) = 0 \quad (1.43)$$

avec \bar{x}_k les points utilisés pour effectuer les moindres-carrés, \mathbf{n} une approximation de la normale, ω_i des poids judicieusement sélectionnés pour rendre compte de l'influence des points dans le calcul de l'équation locale de la surface et \mathbf{M} la matrice symétrique de la forme quadratique de la surface. Si la surface a pour équation générique $Ax^2 + By^2 + Cz^2 + 2Dyz + 2Ezx + 2Fxy + 2Gx + 2Hy + 2Iz + J$, la matrice \mathbf{M} de la forme quadratique (uniquement les termes $x^m y^n$ de degré $m + n = 2$) est donnée par la relation (1.44).

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} A & F & E \\ F & B & D \\ E & D & C \end{pmatrix} \quad (1.44)$$

Un nombre suffisant de points est choisi pour rendre le système défini en (1.43) inversible. Les inconnues sont les coefficients de l'équation de la surface. La courbure κ peut être évaluée en

utilisant le gradient et la hessienne de l'équation de la surface [45]. Il est à noter que reconstruire localement une interface n'est pas seulement restreint à la méthode FT. Ainsi, RENARDY et al. [98] développent la méthode PROST (Parabolic Reconstruction Of Surface Tension) dans laquelle la minimisation est opérée entre les fractions volumiques C issues de l'advection de l'interface et celles obtenues en se servant de l'équation locale de l'interface.

Cette présentation montre les différentes approches développées pour traiter des forces de tensions de surface et de l'évaluation de leurs paramètres que sont la courbure et la normale dans la modélisation et la simulation des écoulements. Afin de montrer la validité et l'utilité de ces méthodes, des exemples sont analysés dans la section suivante.

1.3.3 Exemples de l'utilité des approches de traitement des forces de tension de surface et de l'évaluation de la courbure et la normale

Différentes techniques sont employées pour décrire les forces de tensions de surface et calculer les courbures et les normales. Toutefois, pour vérifier leur validité et fiabilité à la réalité, elles doivent être testées sur des cas simples. Un de ces cas tests est celui de la bulle/goutte statique (ou en translation) qui met en lumière l'efficacité des schémas de traitement des forces de tensions de surface et des méthodes de calcul de la courbure et la normale. Les propriétés géométriques de l'interface ne servent pas seulement à estimer les forces de tensions de surface, mais également à la description de phénomène d'atomisation. Une approche utilisant ces informations sera présentée.

Cas test de la bulle/goutte statique

Cette expérience permet de vérifier si les approches de calculs de la courbure et la normale, de même que les techniques de discrétisation des forces de tensions de surface et des gradients de pression respectent la loi de Laplace. Cette dernière se résume en l'équilibre entre le gradient de pression et les forces de tensions de surface pour une bulle/goutte statique (1.38). La proposition reste également vraie pour une bulle/goutte en translation. Si l'opérateur rotationnel est appliqué à l'équation (1.38), la condition se transforme et donne la relation (1.45).

$$(\nabla\kappa) \times (\nabla H) = 0 \quad (1.45)$$

Ainsi pour une bulle/goutte, cette relation est respectée si la courbure reste constante. En effet, la variation de la fonction Heaviside H est dans le sens de la normale à l'interface. Quant à celle de la courbure κ , elle se fait tangentiellement à la surface. Par conséquent, le seul moyen de vérifier la condition (1.45) est d'avoir $\nabla\kappa = 0$ donc $\kappa = cste$. Deux éléments sont donc à vérifier pour la loi de Laplace : la consistance des schémas de discrétisation de forces de tensions de surface et du gradient de pression d'une part, et d'autre part la précision de l'évaluation de la courbure. C'est la violation de ces conditions qui conduit à l'apparition de courants parasites. Plusieurs auteurs se sont penchés sur ce test [1, 32, 92, 117]. Nous présentons la configuration employée par [1] mais l'esprit reste le même dans les autres approches.

Le test (2D) consiste en un cercle de rayon $D = 0.8$ placé dans un domaine carré. La symétrie du problème fait qu'on peut se restreindre qu'à la simulation d'un quart du cercle, placé dans un coin (ici en bas à gauche) d'un domaine carré de côté 1. Les conditions limites sont de type symétrie sur les côtés du carré touchés par le cercle et de non glissement sur les deux autres. Les deux phases ont les mêmes densité ρ et viscosité μ . Les paramètres du problème sont le nombre capillaire Ca_{\max} (1.46) permettant de mesurer l'intensité des courants parasites et le nombre de Laplace La (1.47).

$$Ca_{\max} = \frac{\|\mathbf{u}_{\max}\| \mu}{\sigma} \quad (1.46)$$

$$La = \frac{\sigma \rho D}{\mu^2} \quad (1.47)$$

A cela, il faut ajouter deux temps caractéristiques T_σ (1.48) et T_μ (1.49).

$$T_\sigma = \sqrt{\frac{\rho D^3}{\sigma}} \quad (1.48)$$

$$T_\mu = \frac{\rho D^2}{\mu} \quad (1.49)$$

Ils correspondent respectivement au temps caractéristique des ondes capillaires et à celui de la dissipation visqueuse. Ces deux derniers paramètres sont d'importance car il faut que la simulation soit effectuée pendant un temps suffisamment long ($t > T_\sigma$ et $t > T_\mu$) pour arriver à un état d'équilibre [92, 93]. Sans quoi, la simulation est encore dans un régime transitoire où les courants parasites sont dus plutôt à l'évolution d'une surface initialement perturbée. Ces perturbations sont amorties sur des temps de l'ordre de T_μ .

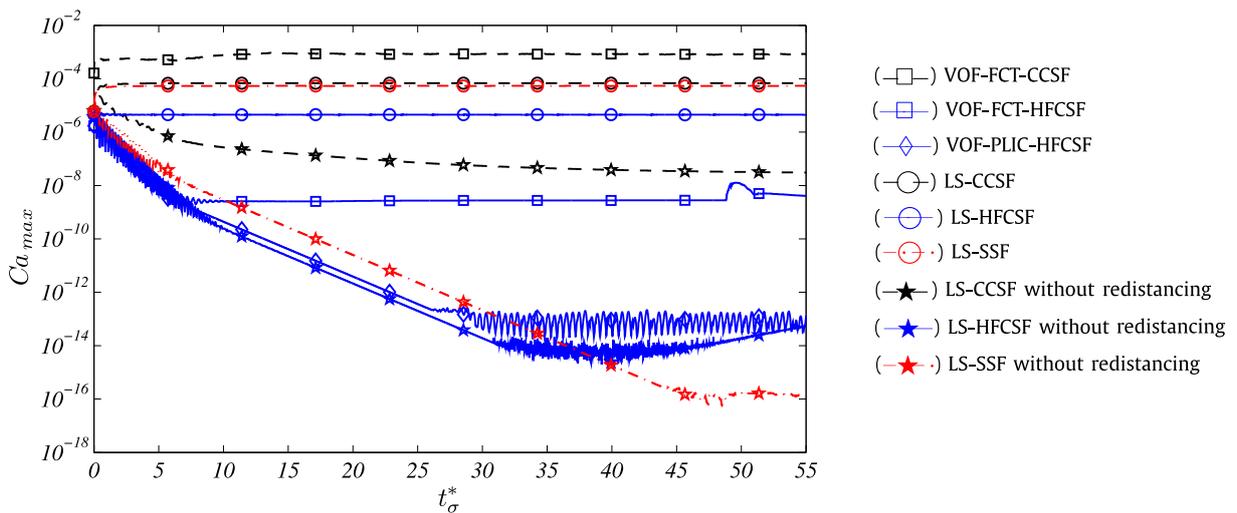


FIGURE 1.6 – Évolution du maximum d'intensité Ca_{\max} des courants parasites dans le domaine de simulation au cours du temps (Fig.3 de [1]).

Dans les travaux de ABADIE et al. [1], différentes méthodes VOF et LS sont testées. Dans un premier temps, l'équation (1.38) est résolue avec une courbure fixée et constante dans le but de vérifier la consistance des schémas de discrétisation. Le nombre capillaire atteint alors la valeur $Ca_{\max} = 5.08 \times 10^{-18}$, dénotant le respect de la loi de Laplace pour les schémas de discrétisation employés. Par conséquent, dans le cas d'une courbure évaluée numériquement, les courants parasites observés seront dus à la méthode utilisée pour calculer la courbure et à l'existence d'un gradient de courbure à l'interface de la bulle. Différentes techniques d'évaluation de la courbure sont ensuite comparées et les résultats montrant l'évolution de Ca_{\max} en fonction du temps adimensionnel $t_\sigma^* = t/T_\sigma$ sont répertoriés sur la figure 1.6. Dans le cadre des méthodes VOF, les techniques de calcul de courbure utilisant une approche de type CSF n'arrivent pas à réduire les courants parasites. Par contre, l'emploi d'une fonction hauteur permet de les réduire grandement, avec l'approche VOF-PLIC-HFCSF offrant l'erreur la plus faible dans cette catégorie (Fig. 1.6). L'approche CSF combinée avec une méthode LS (LS-CCSF) offre de meilleurs résultats que sa contrepartie VOF. Toutefois, elle ne converge pas, de même que les techniques LS-HFCSF et

LS-SSF. Cependant, ce sont ces deux dernières techniques qui arrivent à réduire les courants parasites à l'ordre de l'erreur machine lorsque l'étape de réinitialisation de la fonction distance n'est pas opérée. L'auteur attribue ce gain de performance dans cette configuration au fait que l'étape de réinitialisation de la fonction distance change la position de l'interface, altérant ainsi le calcul de la courbure. Ces conclusions sur l'impact d'une approche CSF quant aux courants parasites se retrouvent dans d'autres travaux avec une modélisation FT [32, 117] ou VOF [92]. L'idée principale à retenir étant de découpler le calcul de la courbure du gradient de la fonction couleur C , et que ce calcul soit le plus localisé possible sur la surface.

Caractérisation de l'évolution d'une atomisation à partir des données géométriques de l'interface

Les propriétés géométriques de l'interface sont également utiles dans d'autres domaines tels que l'atomisation de jets. Elle met en jeu une multitude d'échelles d'interface rencontrées dans différentes régions du jet atomisé. A la base du jet, les deux phases sont clairement distinctes : on parle alors de régime à phases séparées. Loin de la base du jet où toute une population de gouttes évolue constitue le régime à phase dispersée. La transition entre les deux est le lieu où les deux échelles coexistent, avec la présence de ligaments et gouttes de tailles moyennes. Tandis que le régime à phases séparées peut être résolu avec une approche 2-fluides ou 1-fluide, cela peut être prohibitif dans le régime à phase dispersée à cause de la grande quantité de gouttes/bulles présentes. Une des approches pour simuler ce régime est l'approche probabiliste qui se base sur la Number Density Function (NDF). Elle permet de suivre l'évolution de la population de gouttes grâce à l'équation de Williams-Boltzmann et d'avoir accès à des grandeurs comme la vitesse, la taille, la température pour ne citer que celles-ci. Toutefois, NDF n'est définie que dans le régime à phase dispersée et n'apporte pas d'informations sur le régime à phases séparées. En effet, elle dénombre le nombre de gouttes remplissant certains critères choisis par l'utilisateur, gouttes qui ne se sont pas encore formées dans le régime à phases séparées. Massot et al. [13, 77] introduisent alors la Surface Density Function (SDF) pour d'écrire l'atomisation tout au long de son déroulement. Comme son nom l'indique, elle rend compte de l'aire présentant une caractéristique donnée (courbure moyenne κ , courbure de Gauss κ_G , vitesse de l'interface). Contrairement à NDF, elle est définie tout le long du processus d'atomisation et elle permet ainsi de suivre l'atomisation du régime à phases séparées à celui à phase dispersée. Par ailleurs, un lien est établi entre SDF et NDF grâce au théorème de Gauss-Bonnet qui lie l'intégrale de la courbure de Gauss sur la surface d'un objet à sa caractéristique d'Euler (elle vaut 2 dans le cas d'une sphère). Comme la SDF utilise les données géométriques de l'interface, l'attention quant à l'évaluation de ces données est un élément important. A ce titre, sur un maillage des triangles de l'interface, c'est la méthode de [76] dans sa version barycentrique qui est employée.

1.4 Plan de la thèse

Nous avons vu au travers de cette partie la richesse, la diversité et la complexité des écoulements diphasiques à phases séparées, éléments qui se reflètent également dans les approches pour les modéliser. Quel que soit la méthode utilisée, les forces de tensions de surfaces demeurent un élément clé dans la simulation d'écoulements diphasiques. Elles font intervenir des propriétés géométriques de l'interface que sont la courbure κ et la normale \mathbf{n} à l'interface. Leur bonne évaluation est primordiale tant pour éviter la création de courants parasites, que dans l'établissement de grandeurs macroscopiques (PDF, aire interfaciale) utiles dans des domaines tels que la combustion, l'agroalimentaire ou le milieu pharmaceutique. Ces grandeurs macroscopiques ne fournissent cependant pas suffisamment d'information sur les types de gouttes/bulles rencontrés dans les écoulements diphasiques. C'est dans ce cadre que s'inscrit ce travail dont la finalité est l'établissement d'une base de données permettant la caractérisation et l'identification automatique des courbures et des normales aux interfaces d'écoulements diphasiques. Pour ce faire,

nous avons agencés notre travail comme suit.

- Notre élément principal de travail étant l'interface, l'objectif est d'avoir dans le maximum d'information sur elle. Notre choix s'est porté donc sur le développement d'une méthode Front-Tracking 3D qui à l'avantage de connaître explicitement la position de l'interface. Ainsi le chapitre 2 est consacré à la présentation de cette méthode. Afin de suivre l'évolution topologique et complexe de l'interface, différentes procédures de gestion tant au niveau de la richesse et de la qualité du maillage de l'interface sont présentées. Une procédure de contrôle du volume est également détaillée. Elles ont été entièrement développées et implémentées dans le code de simulation maison FUGU de l'équipe TCM. L'ensemble de ces procédures est ensuite analysé dans un test impliquant la déformation d'une goutte/bulle dans un champ de vitesse tourbillonnaire.
- Le chapitre 3 est méthodes permettant l'évaluation des propriétés de l'interface dans le cadre de l'approche FT. Trois familles de méthodes sont présentées et comparées entre elles pour déterminer leur précision mais également leur robustesse quant à la qualité du maillage de l'interface. Deux tests constituent le creuset de leur comparaison : un test statique employant une surface qui présente une large variété de type de courbure, et un test original dynamique qui permet de faire le lien avec des phénomènes réels tels que l'impact d'une goutte sur une surface ou la rupture d'une goutte. Ce chapitre fait l'objet d'un article en cours de révision dans *Journal of Computational Physics*.
- Le chapitre 4 est consacré à l'introduction et à l'étude d'une grandeur utile pour la caractérisation et l'identification de type de gouttes/bulles comme rencontrés dans le diagramme de Clift. Cette grandeur est analysée puis testée sur des structures simples, à commencer par des sphères et des ellipsoïdes, avant de s'orienter vers des structures complexes de type wobbling. Ce type est modélisé dans ce travail par des perturbations sinueuses et variqueuses dont une étude en fonction des paramètres de la perturbation (amplitude, longueur d'onde, déphasage) est effectuée.

Les travaux entrepris dans ce travail ont permis la publication de quatre articles et la mise en place d'une méthode 3D de suivi d'interface dans le code maison FUGU développé dans l'équipe TCM du laboratoire MSME.

- D.-A. KOFFI BI et al. "Accuracy and convergence of the curvature and normal vector discretizations for 3D static and dynamic front-tracking interfaces". In : *submitted in J. Comput. Phys.* (2021)
- D.-A. KOFFI BI et al. "A Review of Geometrical Interface Properties for 3D Front-Tracking Methods". In : *Turbulence and Interactions*. Sous la dir. de M. DEVILLE et al. Cham : Springer International Publishing, 2021, p. 144-149
- M. TAVARES et al. "A Front-Tracking Method for Multiphase Flows with a Sharp Interface Representation". In : *Turbulence and Interactions*. Sous la dir. de M. DEVILLE et al. Cham : Springer International Publishing, 2021, p. 189-195
- M. TAVARES et al. "A Two-Dimensional Second Order Conservative Front-Tracking Method with an Original Marker Advection Approach Based on Jump Relations". In : *Communications in Computational Physics* 27.5 (2020), p. 1550-1589
- Implémentation d'une méthode 3D de Front-Tracking dans le logiciel-maison FUGU,

développé par l'équipe Transferts de Chaleur et de Matière (TCM) du laboratoire Modélisation et Simulation Multi Échelle (MSME UMR 8208)

Bibliographie

Introduction

- [1] T. ABADIE, J. AUBIN et D. LEGENDRE. “On the combined effects of surface tension force calculation and interface advection on spurious currents within Volume of Fluid and Level Set frameworks”. In : *J. Comput. Phys.* 297 (2015), p. 611-636 (cf. p. 34, 35).
- [3] H. T. AHN et M. SHASHKOV. “Multi-material interface reconstruction on generalized polyhedral meshes”. In : *J. Comput. Phys.* 226 (2007), p. 2096-2132 (cf. p. 27).
- [4] S. L. ANNA. “Droplets and Bubbles in Microfluidic Devices”. In : *Annu. Rev. Fluid Mech.* 48 (2016), p. 285-309 (cf. p. 20, 21).
- [5] M. ATAEI, M. BUSSMANN, V. SHAAYEGAN, F. COSTA, S. HAN et C. B. PARK. “NPLIC : A machine learning approach to piecewise linear interface construction”. In : *Computers and Fluids* 223 (2021), p. 104950 (cf. p. 27).
- [6] E. AULISA, S. M. and R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI. “Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional Cartesian geometry”. In : *J. Comput. Phys.* 225 (2007), p. 2301-2319 (cf. p. 27).
- [7] E. BABINSKY et P. SOJKA. “Modeling drop size distributions”. In : *Prog. Energy Combust. Sci.* 28 (2002), p. 303-329 (cf. p. 20).
- [8] S. BALACHANDAR et J. K. EATON. “Turbulent Dispersed Multiphase Flow”. In : *Annu. Rev. Fluid Mech.* 42 (2010), p. 111-133 (cf. p. 20).
- [10] J. BRACKBILL, D. KOTHE et C. ZEMACH. “A continuum method for modeling surface tension”. In : *J. Comput. Phys.* 100.2 (1992), p. 335-354 (cf. p. 31, 32, 73).
- [11] N. BREMOND et E. VILLERMAUX. “Atomization by jet impact”. In : *J. Fluid Mech.* 549 (2006), p. 273-306 (cf. p. 20).
- [12] C. E. BRENNEN. *Fundamentals of Multiphase Flows*. Cambridge University Press, 2005 (cf. p. 21).
- [13] R. CANU, S. PUGGELLI, M. ESSADKI, B. DURET, T. MÉNARD, M. MASSOT, J. REVEILLON et F. DEMOULIN. “Where does the droplet size distribution come from?” In : *Int. J. Multiphase Flow* 107 (2018), p. 230-245 (cf. p. 36, 72, 73).
- [15] S. CHANDRA et C. T. AVEDISIAN. “On the Collision of a Droplet with a Solid Surface”. In : *Proceedings : Mathematical and Physical Sciences* 432.1884 (jan. 1991), p. 13-41 (cf. p. 21).
- [16] P.-C. CHEN, W.-C. WANG, W. L. ROBERTS et T. FANG. “Spray and atomization of diesel fuel and its alternatives from a single-hole injector using a common rail fuel injection system”. In : *Fuel* 103 (2013), p. 850-861 (cf. p. 21).
- [18] G. COMPÈRE, E. MARCHANDISE et J.-F. REMACLE. “Transient adaptivity applied to two-phase incompressible flows”. In : *J. Comput. Phys.* 227 (2008), p. 1923-1942 (cf. p. 23).

- [19] M. CUTFORTH, P. T. BARTON et N. NIKIFORAKIS. “An efficient moment-of-fluid interface tracking method”. In : *Computers and Fluids* 224 (2021), p. 104964 (cf. p. 27).
- [20] M. DAI et D. P. SCHMIDT. “Adaptive tetrahedral meshing in free-surface flow”. In : *J. Comput. Phys.* 208 (2005), p. 228-252 (cf. p. 23).
- [21] J. DELHAYE. “Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 1.3 (1974), p. 395-409 (cf. p. 23, 72).
- [26] J. DU, B. FIX, J. GLIMM, X. JIA, X. LI, Y. LI et L. WU. “A simple package for front tracking”. In : *J. Comput. Phys.* 213 (2006), p. 613-628 (cf. p. 29, 33, 73, 78, 79, 83, 85, 90, 92, 107, 161, 163).
- [27] L. DUCHEMIN, S. POPINET, C. JOSSERAND et S. ZALESKI. “Jet formation in bubbles bursting at a free surface”. In : *Phys. Fluids* 14.9 (sept. 2002), p. 3000 (cf. p. 19).
- [28] C. DUMOUCHEL. “On the experimental investigation on primary atomization of liquid streams”. In : *Exp. Fluids* 45 (2008), p. 371-422 (cf. p. 20).
- [29] V. DYADECHKO et M. SHASHKOV. “Moment-of-fluid interface reconstruction”. In : *Tech. Rep. LA-UR-05-7571* (2005) (cf. p. 27).
- [32] M. FEBRES et D. LEGENDRE. “Enhancement of a 2D front-tracking algorithm with a non-uniform distribution of Lagrangian markers”. In : *J. Comput. Phys.* 358 (2018), p. 173-200 (cf. p. 34, 36).
- [34] R. FEDKIW, T. ASLAM, B. MERRIMAN et S. OSHER. “A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multi-material flows (the Ghost Fluid method)”. In : *J. Comput. Phys.* 152 (1999). Sous la dir. de J. of COMPUTATIONAL PHYSICS, p. 457-492 (cf. p. 30, 73).
- [35] D. FUSTER, G. AGBAGLAH, C. JOSSERAND, S. POPINET et S. ZALESKI. “Numerical simulation of droplets, bubbles and waves : state of the art”. In : *Fluid Dyn. Res.* 41 (2009), p. 065001 (cf. p. 20).
- [36] D. E. FYFE, E. S. ORAN et M. J. FRITTS. “Surface Tension and Viscosity with Lagrangian Hydrodynamics on a Triangular Mesh”. In : *J. Comput. Phys.* 76 (1988), p. 349-384 (cf. p. 23).
- [37] S. GANESAN et L. TOBISKA. “An accurate finite element scheme with moving meshes for computing 3D-axisymmetric interface flows”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 57 (2008), p. 119-138 (cf. p. 23).
- [38] S. GANESAN et L. TOBISKA. “Arbitrary Lagrangian-Eulerian finite-element method for computation of two-phase flows with soluble surfactants”. In : *J. Comput. Phys.* 231 (2012), p. 3685-3702 (cf. p. 23).
- [39] F. GIBOU, R. FEDKIW et S. OSHER. “A review of level-set methods and some recent applications”. In : *J. Comput. Phys.* 353 (2018), p. 82-109 (cf. p. 28).
- [40] J. GLIMM, M. GRAHAM, J. GROVE, X. LI, T. SMITH, D. TAN, F. TANGERMAN et Q. ZHANG. “Front tracking in two and three dimensions”. In : *Computers & Mathematics with Applications* 35.7 (1998). Advanced Computing on Intel Architectures, p. 1-11 (cf. p. 28).
- [41] J. GLIMM, X. LI, Y. LIU, Z. XU et N. ZHAO. “Conservative Front Tracking with Improved Accuracy”. In : *SIAM J. Numer. Anal.* 41.5 (2003), p. 1926-1947 (cf. p. 29).
- [42] J. GLIMM, J. W. GROVE, X. L. LI et D. C. TAN. “Robust Computational Algorithms for Dynamic Interface Tracking in Three Dimensions”. In : *SIAM J. Sci. Comput.* 21.6 (2000), p. 2240-2256 (cf. p. 29).
- [43] J. GLIMM, J. W. GROVE, X. L. LI, K.-M. SHYUE, Y. ZENG et Q. ZHANG. “Three-dimensional front tracking”. In : *SIAM J. Sci. Comput.* 19.3 (1998), p. 703-727 (cf. p. 28).

- [45] R. GOLDMAN. “Curvature formulas for implicit curves and surfaces”. In : *Comput. Aided Geom. Des.* 22 (2005), p. 632-658 (cf. p. 34, 78, 79).
- [46] S. GONG, W. MA et H. GU. “An experimental investigation on bubble dynamics and boiling crisis in liquid films”. In : *Int. J. Heat Mass Transfer* 79 (2014), p. 694-703 (cf. p. 21).
- [47] M. GOROKHOVSKI et M. HERRMANN. “Modeling Primary Atomization”. In : *Annual Review of Fluid Mechanics* 40 (2008), p. 343-366 (cf. p. 20).
- [48] R. GUILLAUMENT, S. VINCENT et J.-P. CALTAGIRONE. “An original algorithm for VOF based method to handle wetting effect in multiphase flow simulation”. In : *Mech. Res. Commun.* 63 (2015), p. 26-32 (cf. p. 27).
- [49] M. HERRMANN. “Detailed Numerical Simulations of the Primary Atomization of a Turbulent Liquid Jet in Crossflow”. In : *J. Eng. Gas Turbines Power* 132 (juin 2010), p. 061506 (cf. p. 20).
- [50] C. W. HIRT et B. D. NICHOLS. “Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries”. In : *J. Comput. Phys.* 39 (1981), p. 201-225 (cf. p. 26).
- [52] M. JEMISON, M. SUSSMAN et M. SHASHKOV. “Filament capturing with the Multimaterial Moment-of-Fluid method”. In : *J. Comput. Phys.* 28 (2015), p. 149-172 (cf. p. 27).
- [53] D. JURIC et G. TRYGGVASON. “Computations of boiling flows”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 24.3 (1998), p. 387-410 (cf. p. 28).
- [54] I. KATAOKA. “Local instant formulation of two-phase flow”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 12.5 (1986), p. 745-758 (cf. p. 24).
- [55] S. KESHANI, W. R. W. DAUD, M. NOUROUZI, F. NAMVAR et M. GHASEMI. “Spray drying : An overview on wall deposition, process and modeling”. In : *J. Food Eng.* 146 (2015), p. 152-162 (cf. p. 21).
- [56] D.-A. KOFFI BI, M. TAVARES, E. CHENIER et S. VINCENT. “Accuracy and convergence of the curvature and normal vector discretizations for 3D static and dynamic front-tracking interfaces”. In : *submitted in J. Comput. Phys.* (2021) (cf. p. 37).
- [57] D.-A. KOFFI BI, M. TAVARES, É. CHÉNIER et S. VINCENT. “A Review of Geometrical Interface Properties for 3D Front-Tracking Methods”. In : *Turbulence and Interactions*. Sous la dir. de M. DEVILLE, C. CALVIN, V. COUAILLIER, M. DE LA LLAVE PLATA, J.-L. ESTIVALÈZES, T. H. LÊ et S. VINCENT. Cham : Springer International Publishing, 2021, p. 144-149 (cf. p. 37).
- [58] M. KUCHARIK, R. V. GARIMELLA, S. P. SCHOFIELD et M. J. SHASHKOV. “A comparative study of interface reconstruction methods for multi-material ALE simulations”. In : *J. Comput. Phys.* 229 (2010), p. 2432-2452 (cf. p. 27).
- [60] T. LANGRISH et D. FLETCHER. “Spray drying of food ingredients and applications of CFD in spray drying”. In : *Chem. Eng. Process.* 40 (2001), p. 345-354 (cf. p. 21).
- [61] J. C. LASHERAS, E. VILLERMAUX et E. J. HOPFINGER. “Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet”. In : *J. Fluid Mech.* 357 (1998), p. 351-379 (cf. p. 20).
- [62] R. LEBAS, T. MENARD, P. BEAU, A. BERLEMONT et F. DEMOULIN. “Numerical simulation of primary break-up and atomization : DNS and modelling study”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 35 (2009), p. 247-260 (cf. p. 20, 30).
- [63] A. H. LEFEBVRE et V. G. MCDONELL. *Atomization and Sprays*. Second. Combustion : An International Series. CRC Press, 2017 (cf. p. 21).
- [64] D. LEGENDRE et J. MAGNAUDET. “The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow”. In : *J. Fluid Mech.* 368 (1998), p. 81-126 (cf. p. 23).

- [66] H. LHUISSIER et E. VILLERMAUX. “Bursting bubble aerosols”. In : *J. Fluid Mech.* 696 (2012), p. 5-44 (cf. p. 19).
- [68] K. LUO, H. PITSCH, M. PAI et O. DESJARDINS. “Direct numerical simulations and analysis of three-dimensional n-heptane spray flames in a model swirl combustor”. In : *Proc. Combust. Inst.* 33 (2011), p. 2143-2152 (cf. p. 21).
- [69] J. MAGNAUDET. *Méthodes numériques pour les problèmes d’interfaces*. Lalonde les Maures : Ecole de Printemps, mai 1997 (cf. p. 24).
- [70] P. MARMOTTANT et E. VILLERMAUX. “On spray formation”. In : *J. Fluid Mech.* 498 (2004), p. 73-111 (cf. p. 20).
- [75] T. MÉNARD, S. TANGUY et A. BERLEMONT. “Coupling level set/VOF/ghost fluid methods : Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 33 (2007), p. 510-524 (cf. p. 30).
- [76] M. MEYER, M. DESBRUN, P. SCHRODER et A. H. BARR. “Discrete Differential-Geometry Operators for Triangulated 2-Manifolds”. In : *Visualization and Mathematics III*. Sous la dir. de H.-C. HEGE et K. POLTHIER. Springer, 2003, p. 35-57 (cf. p. 33, 36, 75, 76, 81, 85, 90, 92, 107, 152, 154).
- [77] E. MOHAMED, D. FLORENCE, de CHAISEMARTIN STÉPHANE, L. ADAM, M. THIBAUT et M. MARC. “Statistical modeling of the gas-liquid interface using geometrical variables : Toward a unified description of the disperse and separated phase flows”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 120 (2019), p. 103084 (cf. p. 36, 73).
- [78] L. MORAWSKA, G. JOHNSON, Z. RISTOVSKI, M. HARGREAVES, K. MENGERSEN, S. C. B, C. CHAO, Y. LI et D. KATOSHEVSKI. “Size distribution and sites of origin of droplets expelled from the human respiratory tract during expiratory activities”. In : *Aerosol Science* 40.3 (2009), p. 256-269 (cf. p. 21).
- [79] C. MUNDO, M. SOMMERFELD et C. TROPEA. “Droplet-wall collisions : Experimental studies of the deformation and breakup process”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 21.2 (1995), p. 151-173 (cf. p. 21).
- [80] N. NIKOLOPOULOS, A. THEODORAKAKOS et G. BERGELES. “A numerical investigation of the evaporation process of a liquid droplet impinging onto a hot substrate”. In : *Int. J. Heat Mass Transfer* 50 (2007), p. 303-319 (cf. p. 21).
- [81] W. F. NOH et P. WOODWARD. “SLIC (Simple line interface calculation)”. In : *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28 – July 2, 1976 Twente University, Enschede*. Sous la dir. d’A. I. van de VOOREN et P. J. ZANDBERGEN. T. 59. Lecture Notes in Physics. Berlin, Heidelberg : Springer, Berlin, Heidelberg, juil. 1976 (cf. p. 26).
- [82] S. NUKIYAMA. “The maximum and minimum values of the heat Q transmitted from metal to boiling water under atmospheric pressure.” In : *Int. J. Heat Mass Transfer* 9 (1966), p. 1419-1433 (cf. p. 21).
- [83] E. OLSSON et G. KREISS. “A conservative level set method for two phase flow”. In : *J. Comput. Phys.* 210 (2005), p. 225-246 (cf. p. 28).
- [84] E. OLSSON, G. KREISS et S. ZAHEDI. “A conservative level set method for two phase flow II”. In : *J. Comput. Phys.* 225 (2007), p. 785-807 (cf. p. 28).
- [85] S. OSHER et J. A. SETHIAN. “Front Propagating with curvature dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations”. In : *J. Comput. Phys.* 79.1 (nov. 1988), p. 12-49 (cf. p. 27).
- [86] A. PAUDEL, Z. A. WORKU, J. MEEUS, S. GUNS et G. V. den MOOTER. “Manufacturing of solid dispersions of poorly water soluble drugs by spray drying : Formulation and process considerations”. In : *Int. J. Pharm.* (2012), p. 12732 (cf. p. 21).

- [87] C. S. PESKIN. “Numerical analysis of blood flow in the heart”. In : *J. Comput. Phys.* 25.3 (1977), p. 220-252 (cf. p. 31).
- [88] M. PEZO et V. STEVANOVIC. “Numerical prediction of critical heat flux in pool boiling with the two-fluid model”. In : *Int. J. Heat Mass Transfer* 54 (2011), p. 3296-3303 (cf. p. 21).
- [89] J. E. PILLIOD. *An Analysis of Piecewise Linear Interface Reconstruction Algorithms for Volume-of-fluid Methods*. Davis : University of California, sept. 1992 (cf. p. 27).
- [90] J. E. PILLIOD et E. G. PUCKETT. “Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces”. In : *J. Comput. Phys.* 199 (2004), p. 465-502 (cf. p. 27).
- [92] S. POPINET. “An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows”. In : *J. Comput. Phys.* 228.16 (2009), p. 5838-5866 (cf. p. 34-36).
- [93] S. POPINET. “Numerical Models of Surface Tension”. In : *Annu. Rev. Fluid Mech.* 50.1 (2018), p. 49-75 (cf. p. 31, 32, 35).
- [96] E. G. PUCKETT. “A volume-of-fluid interface tracking algorithm with applications to computing shock wave refraction”. In : *Proceedings of the Fourth International Symposium on Computational Fluid Dynamics*. Sous la dir. de H. DWYER. Davis, CA, 1991, p. 933-938 (cf. p. 27).
- [98] Y. RENARDY et M. RENARDY. “PROST : A Parabolic Reconstruction of Surface Tension for the Volume-of-Fluid Method”. In : *J. Comput. Phys.* 183 (2002), p. 400-421 (cf. p. 34).
- [102] S. SAZHIN. *Droplets and Sprays*. Springer, 2014 (cf. p. 20).
- [103] R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI. “Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian-Lagrangian advection”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 41 (2003), p. 251-274 (cf. p. 27).
- [104] SCARDOVELLI et ZALESKI. “Direct Numerical Simulation of free-surface and interfacial flow”. In : *Annu. Rev. Fluid Mech.* 31 (jan. 1999), p. 567-603 (cf. p. 32).
- [106] S. SHIN. “Computation of the curvature field in numerical simulation of multiphase flow”. In : *J. Comput. Phys.* 222.2 (2007), p. 872-878 (cf. p. 32).
- [107] S. SHIN, S. I. ABDEL-KHALIK, V. DARU et D. JURIC. “Accurate representation of surface tension using the level contour reconstruction method”. In : *J. Comput. Phys.* 203 (2005), p. 493-516 (cf. p. 29, 32).
- [108] S. SHIN et D. JURIC. “Modeling Three-Dimensional Multiphase Flow Using a Level Contour Reconstruction Method for Front Tracking without Connectivity”. In : *J. Comput. Phys.* 180.2 (2002), p. 427-470 (cf. p. 29, 73).
- [109] S. SHIN et D. JURIC. “A hybrid interface method for three-dimensional multiphase flows based on front tracking and level set techniques”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 60.7 (2009), p. 753-778 (cf. p. 32).
- [110] S. SHIN, I. YOON et D. JURIC. “The Local Front Reconstruction Method for direct simulation of two- and three-dimensional multiphase flows”. In : *J. Comput. Phys.* 230.17 (2011), p. 6605-6646 (cf. p. 29).
- [111] L. SHUI, J. C. EIJKEL et A. van den BERG. “Multiphase flow in microfluidic systems – Control and applications of droplets and interfaces”. In : *Adv. Colloid Interface Sci.* 133 (2007), p. 35-49 (cf. p. 21).
- [112] S. SOM et S. AGGARWAL. “Effects of primary breakup modeling on spray and combustion characteristics of compression ignition engines”. In : *Combust. Flame* 157 (2010), p. 1179-1193 (cf. p. 21).

- [113] D. SUN et W. TAO. “A coupled volume-of-fluid and level set (VOSET) method for computing incompressible two-phase flows”. In : *Int. J. Heat Mass Transfer* 53 (2010), p. 645-655 (cf. p. 30).
- [114] M. SUSSMAN et E. G. PUCKETT. “A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3D and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows”. In : *J. Comput. Phys.* 162 (2000), p. 301-337 (cf. p. 29).
- [115] M. SUSSMAN, P. SMEREKA et S. OSHER. “A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow”. In : *J. Comput. Phys.* 114 (1994), p. 146-159 (cf. p. 28).
- [117] M. TAVARES. “Simulation et modélisation multi-échelle d’écoulements diphasiques”. Thèse de doct. Université Paris-Est, juin 2019 (cf. p. 30, 34, 36).
- [118] M. TAVARES, D.-A. KOFFI BI, E. CHENIER et S. VINCENT. “A Two-Dimensional Second Order Conservative Front-Tracking Method with an Original Marker Advection Approach Based on Jump Relations”. In : *Communications in Computational Physics* 27.5 (2020), p. 1550-1589 (cf. p. 37, 45).
- [119] M. TAVARES, D.-A. KOFFI BI, E. CHÉNIER et S. VINCENT. “A Front-Tracking Method for Multiphase Flows with a Sharp Interface Representation”. In : *Turbulence and Interactions*. Sous la dir. de M. DEVILLE, C. CALVIN, V. COUAILLIER, M. DE LA LLAVE PLATA, J.-L. ESTIVALÈZES, T. H. LÊ et S. VINCENT. Cham : Springer International Publishing, 2021, p. 189-195 (cf. p. 37).
- [120] D. J. TORRES et J. U. BRACKBILL. “The Point-Set Method : Front-Tracking without Connectivity”. In : *J. Comput. Phys.* 165 (2000), p. 620-644 (cf. p. 29, 30, 47).
- [122] G. TRYGGVASON, B. BUNNER, A. ESMAEELI, D. JURIC, N. AL-RAWAHI, W. TAUBER, J. HAN, S. NAS et Y.-J. JAN. “A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow”. In : *J. Comput. Phys.* 169.2 (2001), p. 708-759 (cf. p. 29-31, 76, 77).
- [123] G. TRYGGVASON, R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI. *Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows*. 1^{re} éd. Cambridge University Press, 2011 (cf. p. 31, 77, 82, 85, 90, 93, 95, 107).
- [124] S. O. UNVERDI et G. TRYGGVASON. “A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows”. In : *J. Comput. Phys.* 100.1 (1992), p. 25-37 (cf. p. 28).
- [126] E. VILLERMAUX. “Fragmentation”. In : *Annu. Rev. Fluid Mech.* 39 (2007), p. 419-446 (cf. p. 19).
- [127] E. VILLERMAUX et B. BOSSA. “Drop fragmentation on impact”. In : *J. Fluid Mech.* 668 (2011), p. 412-435 (cf. p. 21).
- [129] S. WILDEMAN, C. W. VISSER, C. SUN et D. LOHSE. “On the spreading of impacting drops”. In : *J. Fluid Mech.* 805 (2016), p. 636-655 (cf. p. 21).
- [130] F. XIAO, Y. HONMA et T. KONO. “A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 48 (2005), p. 1023-1040 (cf. p. 27).
- [131] F. XIAO, S. LI et C. CHEN. “Revisit to the THINC scheme : A simple algebraic VOF algorithm”. In : *J. Comput. Phys.* 230 (2011), p. 7086-7092 (cf. p. 27).
- [135] D. L. YOUNGS. “Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion.” In : *Numerical methods for Fluid Dynamics* 24(2) (1982), p. 273-285 (cf. p. 26).
- [137] D. ZHAO, Y. TOBA, Y. SUZUKI et S. KOMORI. “Effect of wind waves on air-sea gas exchange : proposal of an overall CO₂ transfer velocity formula as a function of breaking-wave parameter”. In : *Tellus* (2003), p. 478-487 (cf. p. 19).

Chapitre 2

Gestion du maillage de l'interface

Sommaire

2.1	Notation	45
2.2	Transport des marqueurs de l'interface	48
2.3	Enrichissement	49
2.3.1	Un nouvel élément : $(n_e^{(n)} - 3) = 1$	52
2.3.2	Deux nouveaux éléments : $(n_e^{(n)} - 3) = 2$	53
2.3.3	Trois nouveaux éléments : $(n_e^{(n)} - 3) = 3$	54
2.4	Désenrichissement	55
2.5	Amélioration de la qualité du maillage	57
2.5.1	Échange d'arête	57
2.5.2	Lissage	60
2.5.3	Suppression de mauvais triangles	61
2.6	Conservation du volume	61
2.7	Validation - Interface sphérique dans un champ tourbillonnaire . .	63

2.1 Notation

Dans la méthode front-tracking (suivi d'interface), plusieurs éléments sont à prendre en compte pour effectuer un suivi efficace de l'évolution complexe de l'interface. Des marqueurs de l'interface aux éléments triangulaires discrétisant la surface, en passant par la désignation de leurs voisins, ce sont autant de grandeurs que nous définissons ici de manière formelle pour une identification plus simple par la suite. Nous nous appuyons sur la nomenclature utilisée par TAVARES et al. [118], que nous étendons au front-tracking 3D.

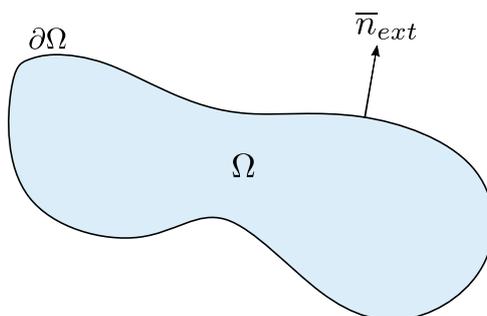


FIGURE 2.1 – Le volume Ω est délimité par une surface $\partial\Omega$. La normale extérieure \bar{n}_{ext} pointe vers le milieu extérieur à Ω .

Ainsi, soit un volume Ω , délimité par la surface $\partial\Omega$. Cette surface est l'interface séparant l'intérieur de Ω du milieu extérieur. Nous définissons par \bar{n}_{ext} la normale extérieure à $\partial\Omega$ (Fig. 2.1). Nous notons $\mathcal{D} = (\mathcal{E}, \mathcal{M}, \mathcal{T})$ l'ensemble caractérisant la discrétisation de l'interface $\partial\Omega$. Il est constitué de :

- \mathcal{E} l'ensemble des $N_{\mathcal{E}}$ triangles discrétisant la surface. Les **éléments** de \mathcal{E} sont notés e et sont indistinctement appelés triangles ou éléments.
 1. Le terme **arête** est employé pour définir géométriquement les éléments $e \in \mathcal{E}$. Ainsi, les éléments e étant des triangles, ils ont 3 arêtes.
 2. Le terme **segment** relève de la discrétisation des éléments e . En effet, les arêtes de e peuvent être scindés en deux segments par l'ajout d'un point au milieu de l'arête dans l'optique de garder une discrétisation fine de l'interface.
 3. Le **nombre de segments** constituant alors le triangle e est noté n_e , avec $n_e \in \llbracket 3, 6 \rrbracket$.
 4. Le maillage est dit **non-conforme** quand il existe un élément $e \in \mathcal{E}$ tel que $n_e > 3$.
- \mathcal{M} l'ensemble des $N_{\mathcal{M}}$ marqueurs $m \in \mathcal{M}$ du maillage de l'interface.
 1. Les **marqueurs** constituent les extrémités des segments composant les triangles $e \in \mathcal{E}$. Par ailleurs, la quantité n_e désigne aussi le nombre de marqueurs de l'élément e .
 2. Le **i -ème marqueur** m de l'élément e est identifié par $m_{[e,i]}$, avec $i \in \llbracket 1, n_e \rrbracket$.
 3. Les **coordonnées** associées à $m_{[e,i]}$ sont désignées par $\bar{x}_{e,i}$ et sa **vitesse** par $\bar{v}_{e,i}$.
 4. Les **sommets du triangle** e sont désignés par $m_{[e,i]}$, avec $i \leq 3$. Les marqueurs ajoutés au **milieu des arêtes** du triangle e sont indiqués par $m_{[e,i]}$, avec $i > 3$.
- \mathcal{T} l'ensemble des $N_{\mathcal{T}}$ n_e -uplets tels que $\forall e \in \mathcal{E}$, $(m_{[e,1]}, \dots, m_{[e,n_e]}) \in \mathcal{T}$. Les n_e -uplets étant ordonnés, l'**orientation** ou sens de parcours local des marqueurs est défini de telle sorte que :

$$\forall e \in \mathcal{E}, \forall i \in \llbracket 2, n_e - 1 \rrbracket, ((\bar{x}_{e,i+1} - \bar{x}_{e,i}) \wedge (\bar{x}_{e,i-1} - \bar{x}_{e,i})) \cdot \bar{n}_{ext} > 0 \quad (2.1)$$

Ainsi, cet ordre se traduit par le fait que toute normale à l'élément e , construite à partir de trois marqueurs d'indices consécutifs, hormis les premiers et derniers marqueurs, possède le même sens que la normale extérieure. Cela nous permet d'avoir une **numérotation locale** des marqueurs. Cette numérotation est temporaire et adaptée au nombre de marqueurs de l'élément e . Nous nous ramènerons aux numérotations présentées sur la figure 2.2, selon les valeurs de n_e .

L'ensemble de discrétisation \mathcal{D} ainsi défini, nous introduisons d'autres notions qui nous sont utiles dans la gestion du maillage de l'interface.

- **marqueurs adjacents** : la numérotation que nous avons établie nous permet de trouver, à partir d'un marqueur i de l'élément e , le marqueur qui le précède ou qui le suit immédiatement dans le triangle. Ainsi, le **marqueur précédant** immédiatement $m_{[e,i]}$ dans l'élément e a pour indice i_0 . Le **marqueur suivant** est repéré par l'indice i_2 . Nous définissons l'opérateur $\text{mod}(a, b)$ comme le reste de la division euclidienne de a par b . En d'autres termes :

$$\text{mod}(a, b) = r, \text{ avec } a = bq + r, (q, r) \in \mathbb{N}^2, r < b$$

Ainsi, les indices i_0 et i_2 sont obtenus de la manière suivante :

$$i_0 = \begin{cases} i + 3 & , \text{ si } (i + 3) \leq n_e \\ \text{mod}(i + 1, 3) + 1 & , \text{ sinon.} \end{cases} \quad (2.2)$$

$$i_2 = \begin{cases} \text{mod}(i, 3) + 1 & , \text{ si } n_e = 3 \\ \text{mod}(i, 4) + 1 + 3 \times \text{E}[(n_e - i - 1)/3] \times \text{E}[(6 - i)/3] & , \text{ sinon.} \end{cases} \quad (2.3)$$

où $\text{E}[\bullet]$ désigne la partie entière de \bullet .

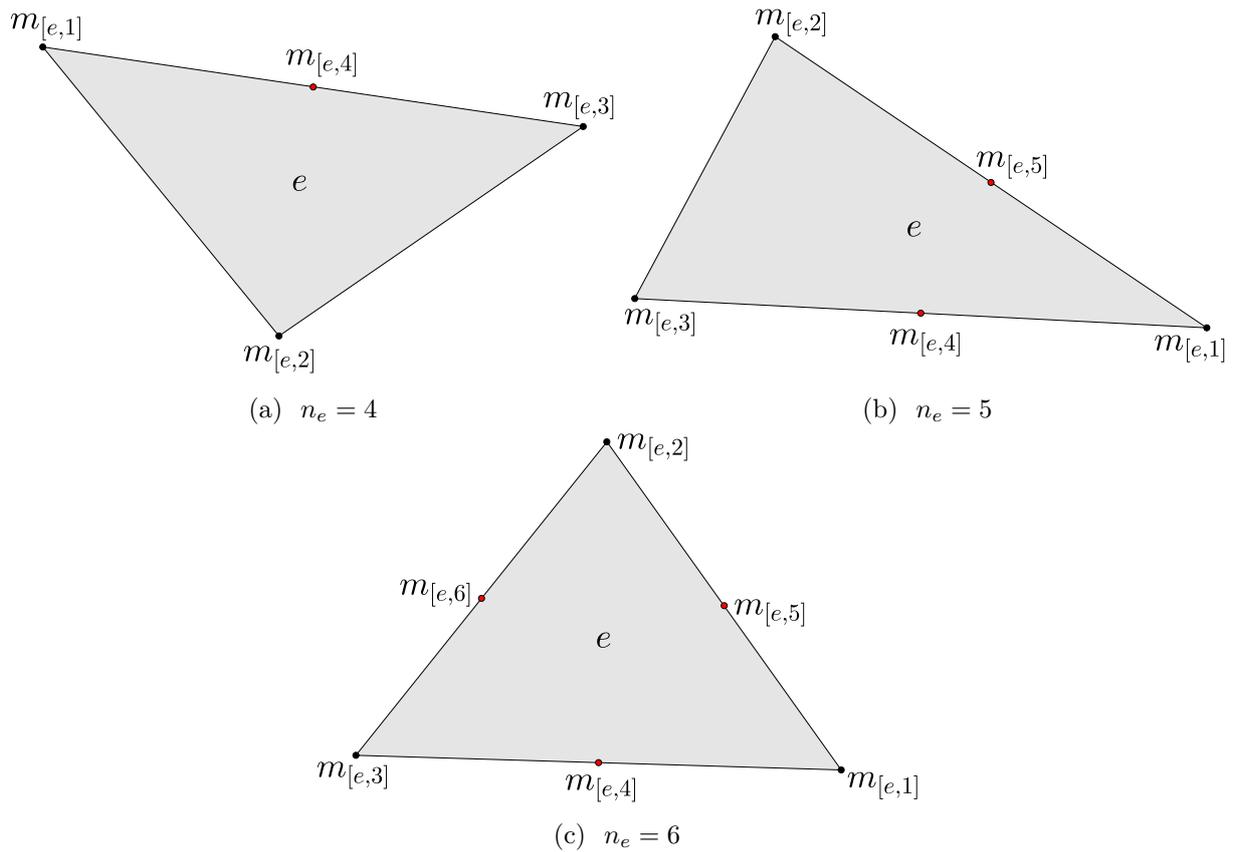


FIGURE 2.2 – Numérotation des marqueurs de l'élément e selon les valeurs de n_e .

- **identification des segments** : l'orientation ou sens de parcours imposé par \bar{n}_{ext} induit une orientation aux segments constituant les triangles. Nous pouvons donc identifier un marqueur initial et un marqueur final pour chaque segment de e . Par conséquent, nous appelons le segment i de l'élément e , le segment formé du marqueur final $m_{[e,i]}$ et du marqueur initial $m_{[e,i_0]}$, avec i_0 défini par l'équation (2.2). Par ailleurs, la **longueur du segment** i de e est notée $d_{e,i}$. Elle est définie par l'équation (2.4) :

$$d_{e,i} = \|\bar{x}_{e,i} - \bar{x}_{e,i_0}\| \quad (2.4)$$

- **connectivité du maillage** : elle correspond à la connaissance des triangles et de leurs voisins, à savoir les éléments ayant un segment en commun. Il existe des méthodes front-tracking sans connectivité [120]. Nous avons choisi de garder une connectivité, car elle facilite l'accès à des propriétés géométriques de l'interface telles que la normale et la courbure, utiles pour le calcul des tensions de surfaces. Le voisin de $e \in \mathcal{E}$ par son segment i est noté $e_{[i]} \in \mathcal{E}$. Ainsi, dire que les éléments $e, e' \in \mathcal{E}$ sont voisins se traduit par l'équation (2.5) :

$$\exists i \in \llbracket 1, n_e \rrbracket, \exists k \in \llbracket 1, n_{e'} \rrbracket \mid e_{[i]} = e' \text{ et } e'_{[k]} = e \quad (2.5)$$

L'ensemble de ces notations est synthétisé sur la figure 2.3. Elle illustre une situation où l'élément initial e possède deux arêtes trop grandes. Elles sont donc coupées en ajoutant deux marqueurs supplémentaires, faisant ainsi de e un triangle composé de 5 segments ($n_e = 5$). Cette configuration non conforme est transitoire mais nécessaire à la gestion et l'évolution du maillage de l'interface.

- **voisinage d'un marqueur** : c'est l'ensemble des couronnes successives d'éléments autour du sommet considéré. Ainsi, le k -ème voisinage du marqueur $m \in \mathcal{M}$ est noté

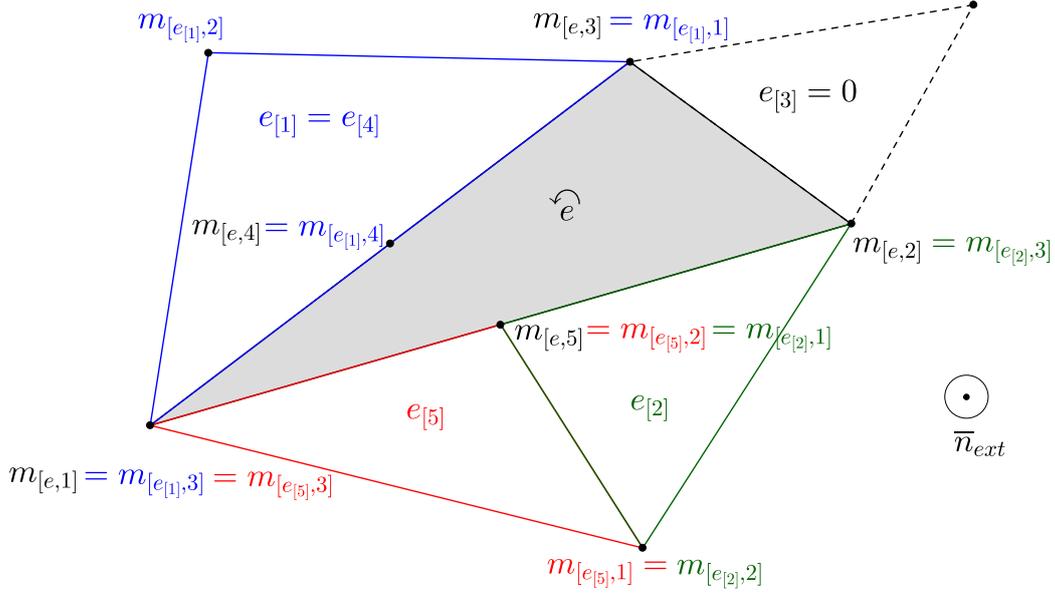


FIGURE 2.3 – L'élément triangulaire initial e , constitué des marqueurs $m_{[e,i]}$, $i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket$, a ses arêtes 1 et 2 trop grandes, ce qui entraîne l'ajout des marqueurs supplémentaires $m_{[e,4]}$ et $m_{[e,5]}$ pour les scinder. L'orientation ou ordre de la numérotation est donnée par la normale sortante \vec{n}_{ext} .

$\mathcal{N}_{[k,m]} \subset \mathcal{E}$. De manière précise, nous avons :

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{[1,m]} &= \left\{ e \in \mathcal{E} \mid \exists! j \in \llbracket 1, n_e \rrbracket, m_{[e,j]} = m \right\} \\ \mathcal{N}_{[k,m]} &= \left\{ e \in \mathcal{E} \setminus \mathcal{N}_{[k-1,m]} \mid \exists e' \in \mathcal{N}_{[k-1,m]}, e \cap e' \neq \emptyset \right\} \cup \mathcal{N}_{[k-1,m]}, \quad k \geq 2 \end{aligned} \quad (2.6)$$

Nous voyons, d'après l'équation (2.6), que le premier voisinage $\mathcal{N}_{[1,m]}$ du marqueur m est l'ensemble des triangles ayant m en commun. Son second voisinage $\mathcal{N}_{[2,m]}$ comprend, en plus des triangles du premier voisinage, les éléments qui ont un segment ou un sommet en commun avec les triangles du premier voisinage. Et ainsi de suite. La **connectivité du marqueur** m correspond au cardinal de son premier voisinage $\mathcal{N}_{[1,m]}$.

- **évolution temporelle** : l'ensemble de discrétisation $\mathcal{D} = (\mathcal{E}, \mathcal{M}, \mathcal{T})$ évolue au cours du temps. Afin de prendre en compte le caractère instationnaire, cet ensemble et ses composantes sont munis d'un exposant n pour définir son état à l'instant $t^{(n)}$. Ainsi, l'ensemble caractérisant la discrétisation de l'interface à l'instant $t^{(n)}$ est noté $\mathcal{D}^{(n)} = (\mathcal{E}^{(n)}, \mathcal{M}^{(n)}, \mathcal{T}^{(n)})$.

2.2 Transport des marqueurs de l'interface

Dans la méthode front-tracking, l'interface est suivie de manière explicite. Pour ce faire, en plus du maillage fixe utilisé pour la résolution des équations de Navier-Stokes, l'interface bénéficie d'un maillage qui lui est propre. Ce maillage est constitué de triangles et ce sont les sommets de ces triangles qui sont transportés pour rendre compte de l'évolution de l'interface. La figure 2.4 nous montre un exemple :

Le transport des sommets des triangles, ou encore marqueurs, se fait de manière lagrangienne. Ainsi, pour tout marqueur i de e , $m_{[e,i]}$, l'évolution de sa position au cours du temps est définie par :

$$\frac{d}{dt}(\bar{x}_{e,i}) = \bar{v}_{e,i} \quad (2.7)$$

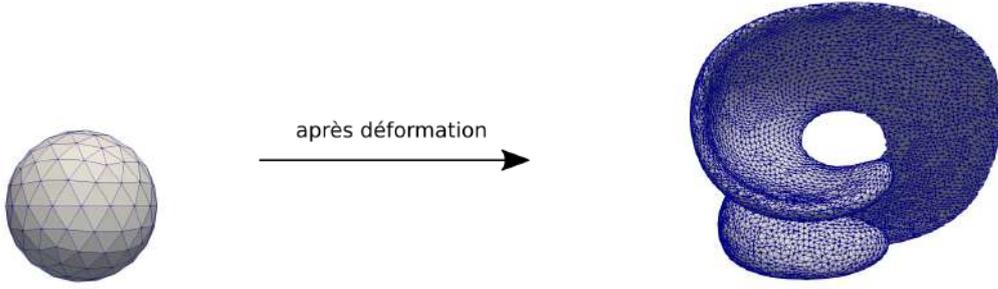


FIGURE 2.4 – La surface de la sphère est maillée par des triangles. Les sommets sont transportés et suivent les changements topologiques de l'interface

Afin d'avoir la position des marqueurs, nous utilisons un schéma d'interpolation de Runge-Kutta d'ordre 2 (RK2). Ainsi, en notant Δt l'écart temporel entre les instants t^n et t^{n+1} , les positions des marqueurs à l'instant t^{n+1} se déterminent de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\bar{x}_{e,i}^{(*)} &= \bar{x}_{e,i}^{(n)} + \Delta t \cdot \bar{v}_{e,i}^{(n)} \\ \bar{x}_{e,i}^{(n+1)} &= \bar{x}_{e,i}^{(n)}/2 + (\bar{x}_{e,i}^{(*)} + \Delta t \cdot \bar{v}_{e,i}^{(n+1)})/2\end{aligned}\quad (2.8)$$

$\bar{v}_{e,i}^{(n+1)}$ est obtenue par une méthode d'extrapolation temporelle d'ordre 2 d'Adams-Bashforth :

$$\bar{v}_{e,i}^{(n+1)} = 2\bar{v}_{e,i}^{(n)} - \bar{v}_{e,i}^{(n-1)}\quad (2.9)$$

La vitesse des marqueurs à un instant donné k est calculée avec la méthode PERM (Parabolic Edge Reconstruction Method), comme définie dans les travaux de MCDERMOTT et al. [74]. Elle est déterminée à partir des vitesses adjacentes du maillage eulérien :

$$\mathbf{V}_i^k = f(u_{i,j}^k, u_{i+1,j}^k, u_{i,j+1}^k, u_{i+1,j+1}^k)$$

FIGURE 2.5 – Détermination de la vitesse des marqueurs par la méthode *PERM*. Elle est obtenue à partir des vitesses adjacentes issues du maillage eulérien.

2.3 Enrichissement

Afin de suivre la dynamique de l'interface, il est nécessaire d'avoir suffisamment de triangles pour décrire le mouvement et les déformations de celle-ci. Ainsi, nous définissons l'enrichissement comme étant l'ajout d'éléments et de marqueurs sur le maillage lagrangien, dans l'optique de capter au mieux les changements topologiques de l'interface. En effet, avec une discrétisation initiale $\mathcal{D}^{(0)}$, si $\mathcal{D}^{(n)}$ n'évolue pas au cours du temps, nous pouvons arriver à des situations où

le maillage lagrangien ne décrit plus l'interface et n'arrive plus à capter toutes les déformations topologiques de l'interface. Un cas typique est illustré sur la figure 2.6. Nous voyons la déformation maximale d'une sphère de rayon 0.15, initialement placée dans un cube unitaire à la position (0.35, 0.35, 0.35). Elle est soumise à un champ incompressible de vitesse, combinant des déformations dans les plans $(x - y)$ et $(x - z)$. Ce champ de vitesse, initialement proposé par LEVEQUE [65], et repris par ENRIGHT et al. [30], est construit selon l'équation (2.10) :

$$\begin{aligned} u(x, y, z) &= 2\sin^2(\pi x)\sin(2\pi y)\sin(2\pi z) \\ v(x, y, z) &= -\sin(2\pi x)\sin^2(\pi y)\sin(2\pi z) \\ w(x, y, z) &= -\sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\sin^2(\pi z) \end{aligned} \quad (2.10)$$

Il est modulé en temps par une fonction sinusoïdale $2T$ -périodique $\cos(\pi t/T)$. Ainsi, la défor-

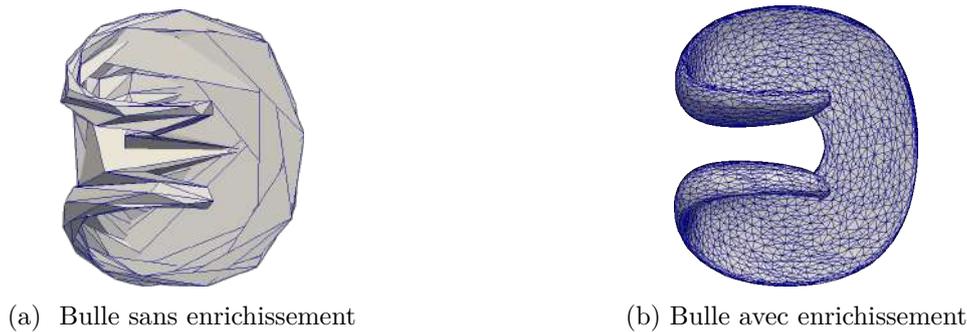


FIGURE 2.6 – Sphère au maximum de déformation ($t = T/2$) dans un champ incompressible de vitesse (Eq. (2.10)). Les deux sphères ont le même maillage initial. A gauche (a), nous n'appliquons pas d'enrichissement. A droite (b), l'enrichissement est activé.

mation maximale est obtenue pour $t = T/2$. Comme nous pouvons le voir sur la figure 2.6a, il est clair que l'absence d'enrichissement peut conduire à des aberrations, telles que des triangles qui se recouvrent, s'entrecoupent, ou encore la présence de triangles dans des zones où il ne devrait pas en avoir. Ce sont des phénomènes que nous évitons en activant l'enrichissement (Fig. 2.6b).

La mise en œuvre de l'enrichissement passe par la détermination de critères pour raffiner ou subdiviser le maillage de l'interface. Différentes approches existent telles que celles proposées par ROGHAIR et al. [99]. Par la suite, nous présentons les critères que nous avons pour effectuer l'enrichissement du maillage de l'interface.

Longueur des arêtes : les arêtes de l'élément e sont scindés en deux si leur longueur $d_{e,i}$ est supérieure à la taille h des cellules de la grille eulérienne.

$$\text{si } d_{e,i} \geq h \text{ alors enrichir} \quad (2.11)$$

L'enrichissement est effectué si l'équation (2.11) est satisfaite. Il est constitué de deux étapes, à savoir, d'une part **la scission des arêtes** et donc l'ajout de nouveaux marqueurs sur le triangle e , et d'autre part la **création de nouveaux triangles** à partir de e . Cet ensemble de processus conduit à un maillage interfacial transitoirement non-conforme (voir section 2.1, page 46) comme illustré sur la figure 2.3. Cela se traduit par :

$$\exists e \in \mathcal{E}^{(n)} \mid n_e > 3$$

A la fin du processus d'enrichissement, le maillage redevient conforme. En d'autres termes :

$$\forall e \in \mathcal{E}^{(n)}, \quad n_e = 3$$

Scission des arêtes : tous les éléments e de $\mathcal{E}^{(n)}$, hormis les nouveaux formés au cours de l'enrichissement, sont analysés tour à tour. En notant $\mathcal{E}_{new}^{(n)}$ l'ensemble de éléments nouvellement

formés lors de l'enrichissement, nous pouvons synthétiser la phase de scission des arêtes comme suit :

$$\forall e \in \mathcal{E}^{(n)} \setminus \mathcal{E}_{new}^{(n)}, \text{ pour } A = 1 + (n_e^{(n)} - 3) \text{ fixé, } \forall i \in \llbracket A, 3 \rrbracket$$

$$\text{si } d_{e,i}^{(n)} \geq h \text{ alors } \begin{cases} - n_e^{(n)} = n_e^{(n)} + 1 \\ - \text{Création du marqueur } m_{[e, n_e^{(n)}]} \text{ tel que } \bar{x}_{e, n_e^{(n)}} = (\bar{x}_{e,i} + \bar{x}_{e,i_0})/2 \\ - N_{\mathcal{M}}^{(n)} = N_{\mathcal{M}}^{(n)} + 1 \end{cases} \quad (2.12)$$

En d'autres termes, nous regardons d'abord le nombre $n_e^{(n)}$ de segments (ou de marqueurs) qui constitue l'élément e . Si $n_e^{(n)} = 3$, alors $A = 1$ et nous vérifions donc la longueur de ses trois arêtes ($i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket$). Dans le cas $n_e^{(n)} \in \llbracket 4, 5 \rrbracket$, une ou deux arêtes ont déjà été scindées par l'effet de ses voisins. Ainsi, pour $n_e^{(n)} = 5$, $A = 3$ et $i \in \llbracket 3, 3 \rrbracket$. Seule l'arête 3 est analysée. Dans l'éventualité où $n_e^{(n)} = 6$, aucune analyse supplémentaire des arêtes n'est à effectuer. Ainsi, quel que soit le cas de figure, si les conditions sont remplies, de nouveaux marqueurs sont rajoutés sur les arêtes de e , et son nombre de segments $n_e^{(n)}$ est mis à jour, de même que le nombre total $N_{\mathcal{M}}^{(n)}$ de marqueurs du maillage de l'interface.

Pour la création des nouveaux triangles, trois cas de figures sont possibles, selon les valeurs de $n_e^{(n)}$. En effet, $(n_e^{(n)} - 3)$ représente le nombre de nouveaux éléments à créer.

2.3.1 Un nouvel élément : $(n_e^{(n)} - 3) = 1$

L'élément e possède une seule grande arête qui a été scindée. Il est ainsi formé de 4 segments (Fig. 2.7a). Ses voisins $e_{[1]}$ et $e_{[4]}$ peuvent être différents ou non. En effet, les pointillés sur la figure 2.7 représente le fait que le voisin de e a été coupé ou non. S'il a été coupé, $e_{[1]} \neq e_{[4]}$. Dans le cas contraire, son voisin est l'unique élément $e_{[1]} = e_{[4]}$. Deux nouveaux éléments e' et e'' sont créés en construisant une arête entre le nouveau marqueur $m_{[e,4]}$ et le marqueur opposé $m_{[e,2]}$. Les connectivités sont ensuite mises à jour, tandis que le triangle e est supprimé (Fig. 2.7b). Ainsi, un seul élément est effectivement ajouté au maillage. L'ensemble des opérations à mener lors de cet enrichissement est synthétisé dans l'algorithme 2.1.

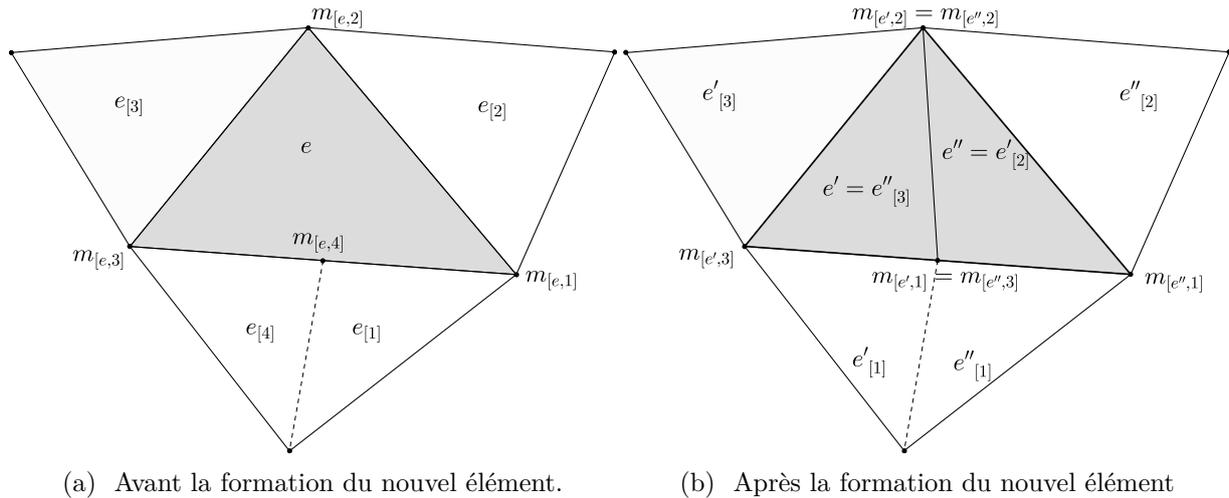


FIGURE 2.7 – L'élément e est constitué de 4 segments (a). Deux nouveaux éléments e' et e'' sont formés et l'élément e est supprimé. Les connectivités sont mises à jour (b).

```

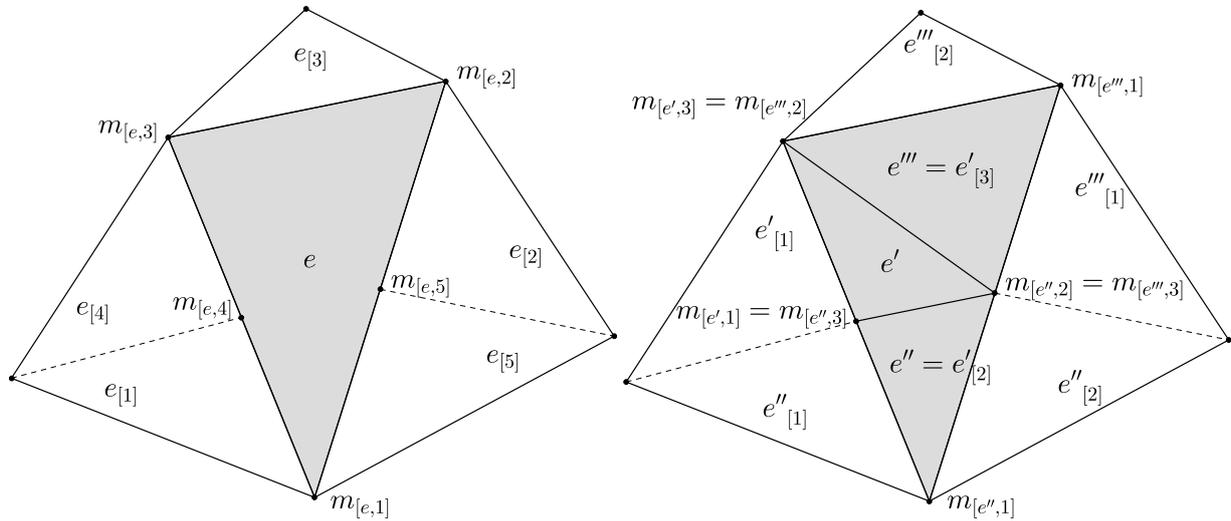
1  $m_{[e',1]} = m_{[e,4]}$  ;  $m_{[e',2]} = m_{[e,2]}$  ;  $m_{[e',3]} = m_{[e,3]}$  ! Création de l'élément  $e'$ 
2  $m_{[e'',1]} = m_{[e,1]}$  ;  $m_{[e'',2]} = m_{[e,2]}$  ;  $m_{[e'',3]} = m_{[e,4]}$  ! Création de l'élément  $e''$ 
3  $e'_{[1]} = e_{[4]}$  ;  $e'_{[2]} = e''$  ;  $e'_{[3]} = e_{[3]}$  ! Connectivité de  $e'$ 
4  $e''_{[1]} = e_{[1]}$  ;  $e''_{[2]} = e_{[2]}$  ;  $e''_{[3]} = e'$  ! Connectivité de  $e''$ 
5 ! Mise à jour de la connectivité des voisins
6 do  $i = 1, n_e$ 
7      $\tilde{e} = e_{[i]}$ 
8      $k = 1$ 
9     do while ( $\tilde{e}_{[k]} \neq e$ ) ! Recherche du segment commun entre  $\tilde{e}$  et  $e$ 
10          $k = k + 1$ 
11     end do
12     if ( $i \leq 2$ ) then
13          $\tilde{e}_{[k]} = e''$ 
14     else
15          $\tilde{e}_{[k]} = e'$ 
16     end if
17 end do
18 Suppression de  $e$ 
19  $N_{\mathcal{E}}^{(n)} = N_{\mathcal{E}}^{(n)} + 1$  ;  $N_{\mathcal{T}}^{(n)} = N_{\mathcal{T}}^{(n)} + 1$  ! Mise à jour des cardinaux de  $\mathcal{E}^{(n)}$  et  $\mathcal{T}^{(n)}$ 

```

Listing 2.1 – Enrichissement - Ajout effectif d'un élément

2.3.2 Deux nouveaux éléments : $(n_e^{(n)} - 3) = 2$

Dans le cas où le triangle e est discrétisé en 5 segments, deux segments sont construits entre $m_{[e,4]}$ et $m_{[e,5]}$ d'une part, et entre $m_{[e,5]}$ et $m_{[e,3]}$ d'autre part. Deux éléments sont effectivement ajoutés au maillage lagrangien (Fig. 2.8). Nous résumons les diverses étapes qui conduisent à ce résultat dans l'algorithme 2.2.



(a) Avant la formation des nouveaux éléments. (b) Après la formation des nouveaux éléments

FIGURE 2.8 – L'élément e est formé de 5 segments (a). Trois nouveaux éléments e' , e'' et e''' sont créés et l'élément e est supprimé. Le choix de construire les trois éléments et de les disposer dans cet ordre est fixé. Les voisins sont également mis à jour (b).

```

1  $m_{[e',1]} = m_{[e,4]}$  ;  $m_{[e',2]} = m_{[e,5]}$  ;  $m_{[e',3]} = m_{[e,3]}$  ! Création de l'élément  $e'$ 
2  $m_{[e'',1]} = m_{[e,1]}$  ;  $m_{[e'',2]} = m_{[e,5]}$  ;  $m_{[e'',3]} = m_{[e,4]}$  ! Création de l'élément  $e''$ 
3  $m_{[e''',1]} = m_{[e,2]}$  ;  $m_{[e''',2]} = m_{[e,3]}$  ;  $m_{[e''',3]} = m_{[e,5]}$  ! Création de l'élément  $e'''$ 
4  $e'_{[1]} = e_{[4]}$  ;  $e'_{[2]} = e''_{[3]}$  ;  $e'_{[3]} = e'''_{[3]}$  ! Connectivité de  $e'$ 
5  $e''_{[1]} = e_{[1]}$  ;  $e''_{[2]} = e_{[5]}$  ;  $e''_{[3]} = e'_{[3]}$  ! Connectivité de  $e''$ 
6  $e'''_{[1]} = e_{[2]}$  ;  $e'''_{[2]} = e_{[3]}$  ;  $e'''_{[3]} = e'_{[3]}$  ! Connectivité de  $e'''$ 
7 ! Mise à jour de la connectivité des voisins
8 do  $i = 1, n_e$ 
9      $\tilde{e} = e_{[i]}$ 
10     $k = 1$ 
11    do while ( $\tilde{e}_{[k]} \neq e$ ) ! Recherche du segment commun entre  $\tilde{e}$  et  $e$ 
12         $k = k + 1$ 
13    end do
14    if ( $\text{mod}(i, 4) = 1$ )  $\tilde{e}_{[k]} = e''$  !  $i \in \{1, 5\}$ 
15    if ( $2 \leq i \leq 3$ )  $\tilde{e}_{[k]} = e'''$ 
16    if ( $i = 4$ )  $\tilde{e}_{[k]} = e'$ 
17 end do
18 Suppression de  $e$ 
19  $N_{\mathcal{E}}^{(n)} = N_{\mathcal{E}}^{(n)} + 2$  ;  $N_{\mathcal{T}}^{(n)} = N_{\mathcal{T}}^{(n)} + 2$  ! Mise à jour des cardinaux de  $\mathcal{E}^{(n)}$  et  $\mathcal{T}^{(n)}$ 

```

Listing 2.2 – Enrichissement - Ajout effectif de deux éléments

2.3.3 Trois nouveaux éléments : $(n_e^{(n)} - 3) = 3$

Le choix de construction des éléments est beaucoup moins compliqué que précédemment. L'élément e est divisé en 4 petits éléments en construisant des segments entre les marqueurs $m_{[e,i]}$, $i \in \llbracket 4, 6 \rrbracket$ (Fig. 2.9). La procédure est résumée dans l'algorithme 2.3.

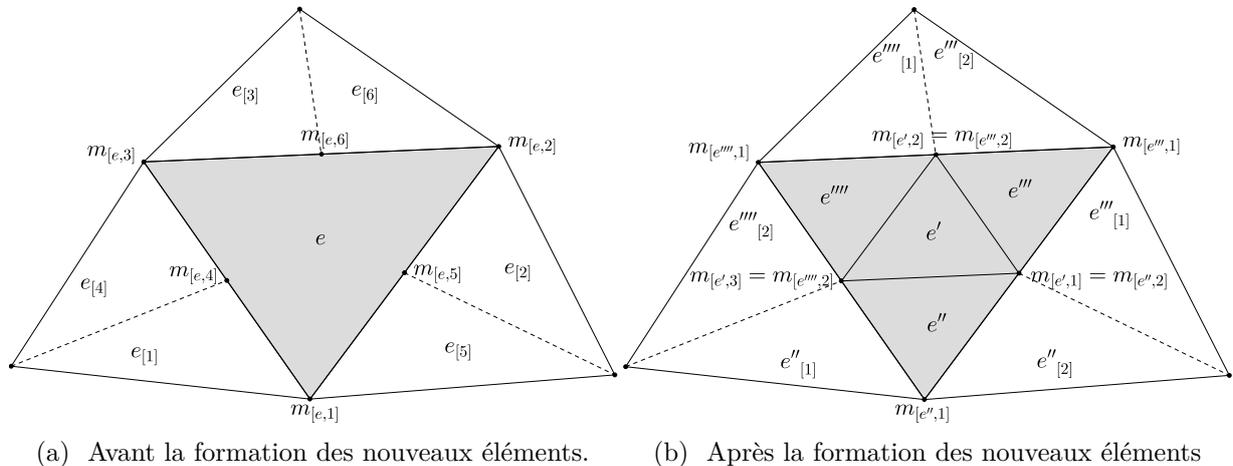


FIGURE 2.9 – L'élément e possède 6 segments (a). Quatre nouveaux éléments e' , e'' , e''' et e'''' sont créés tandis que l'élément e est supprimé. Les voisins sont également mis à jour (b).

```

1   $m_{[e',1]} = m_{[e,5]}$  ;  $m_{[e',2]} = m_{[e,6]}$  ;  $m_{[e',3]} = m_{[e,4]}$  ! Création de l'élément  $e'$ 
2   $m_{[e'',1]} = m_{[e,1]}$  ;  $m_{[e'',2]} = m_{[e,5]}$  ;  $m_{[e'',3]} = m_{[e,4]}$  ! Création de l'élément  $e''$ 
3   $m_{[e''',1]} = m_{[e,2]}$  ;  $m_{[e''',2]} = m_{[e,6]}$  ;  $m_{[e''',3]} = m_{[e,5]}$  ! Création de l'élément  $e'''$ 
4   $m_{[e''',1]} = m_{[e,3]}$  ;  $m_{[e''',2]} = m_{[e,4]}$  ;  $m_{[e''',3]} = m_{[e,6]}$  ! Création de l'élément  $e''''$ 
5   $e'_{[1]} = e''$  ;  $e'_{[2]} = e'''$  ;  $e'_{[3]} = e''''$  ! Connectivité de  $e'$ 
6   $e''_{[1]} = e_{[1]}$  ;  $e''_{[2]} = e_{[5]}$  ;  $e''_{[3]} = e'$  ! Connectivité de  $e''$ 
7   $e'''_{[1]} = e_{[2]}$  ;  $e'''_{[2]} = e_{[6]}$  ;  $e'''_{[3]} = e'$  ! Connectivité de  $e'''$ 
8   $e''''_{[1]} = e_{[3]}$  ;  $e''''_{[2]} = e_{[4]}$  ;  $e''''_{[3]} = e'$  ! Connectivité de  $e''''$ 
9  ! Mise à jour de la connectivité des voisins
10 do  $i = 1, n_e$ 
11      $\tilde{e} = e_{[i]}$ 
12      $k = 1$ 
13     do while ( $\tilde{e}_{[k]} \neq e$ ) ! Recherche du segment commun entre  $\tilde{e}$  et  $e$ 
14          $k = k + 1$ 
15     end do
16     if ( $\text{mod}(i, 4) = 1$ ) then !  $i \in \{1, 5\}$ 
17          $\tilde{e}_{[k]} = e''$ 
18     elseif ( $\text{mod}(i, 4) = 2$ ) then !  $i \in \{2, 6\}$ 
19          $\tilde{e}_{[k]} = e'''$ 
20     else !  $i \in \{3, 4\}$ 
21          $\tilde{e}_{[k]} = e''''$ 
22     end if
23 end do
24 Suppression de  $e$ 
25  $N_{\mathcal{E}}^{(n)} = N_{\mathcal{E}}^{(n)} + 3$  ;  $N_{\mathcal{T}}^{(n)} = N_{\mathcal{T}}^{(n)} + 3$  ! Mise à jour des cardinaux de  $\mathcal{E}^{(n)}$  et  $\mathcal{T}^{(n)}$ 

```

Listing 2.3 – Enrichissement - Ajout effectif de trois éléments

Ainsi, l'ensemble de ces procédures (Eq. (2.12) et Algos. 2.1-2.3) nous permet d'avoir suffisamment d'éléments pour décrire des interfaces qui s'étirent. Cependant, les écoulements di-

phasiques peuvent présenter également des zones où l'interface se contracte, se traduisant par une diminution des longueurs des arêtes du maillage interfacial. Dans ce genre de situation, il convient de supprimer des marqueurs afin de garder une stabilité du maillage.

2.4 Désenrichissement

L'enrichissement densifie le maillage de l'interface. Toutefois, il n'est pas toujours nécessaire d'avoir beaucoup de triangles pour décrire la topologie de l'interface. En effet, pour des zones de forte courbure, avoir un maillage assez raffiné permet d'avoir une bonne évaluation de l'interface. Cependant, dans des zones de faible courbure, disposer d'un maillage trop fin est prohibitif. De surcroît, des instabilités non-physiques peuvent apparaître sur un maillage trop raffiné [33].

Par conséquent, nous désenrichissons plus dans les zones de faible courbure que dans celles de forte courbure. Nous présentons nos critères pour le désenrichissement, dont les deux premiers sont basés sur les travaux de ROGHAIR et al. [99].

Longueur des arêtes : les arêtes dont la longueur est plus petite que $h/4$ (le quart de la taille des cellules eulériennes) sont marquées pour une potentielle suppression.

$$d_{e,i}^{(n)} \leq h/4 \quad (2.13)$$

Rugosité de l'arête : elle traduit l'appartenance d'une arête à une zone courbée ou non. La rugosité d'une arête est construite à partir de la rugosité des marqueurs qui la délimitent. En effet, $\forall e \in \mathcal{E}^{(n)}$, soit le segment i de e , $i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket$, compris entre les marqueurs $m_{[e,i]}$ et $m_{[e,i_0]}$, avec i_0 défini par l'équation (2.2) (voir section 2.1, page 46). Soient les premiers voisinages associés à ces deux marqueurs, $\mathcal{N}_{[1,m_{[e,i]}]}$ et $\mathcal{N}_{[1,m_{[e,i_0]}]}$ (voir section 2.1, page 47). La rugosité $r_{[e,i]}$ de l'arête i de l'élément e est définie comme la demi-somme de la rugosité de chaque marqueur de l'arête i , $r(m_{[e,i]})$ et $r(m_{[e,i_0]})$.

$$\begin{aligned} r(m_{[e,i]}) &= \min_{(e,e')} [(1 + \bar{n}_e \cdot \bar{n}_{e'})/2], \quad e, e' \in \mathcal{N}_{[1,m_{[e,i]}]} \\ r(m_{[e,i_0]}) &= \min_{(e,e')} [(1 + \bar{n}_e \cdot \bar{n}_{e'})/2], \quad e, e' \in \mathcal{N}_{[1,m_{[e,i_0]}]} \end{aligned}$$

Et la rugosité de l'arête i est :

$$r_{[e,i]} = [r(m_{[e,i]}) + r(m_{[e,i_0]})] / 2 \quad (2.14)$$

où \bar{n}_e et $\bar{n}_{e'}$ sont les normales unitaires aux éléments e et e' . De plus, e et e' sont voisins (Eq. (2.5), section 2.1, page 47). Ainsi, dans les zones planes, $\bar{n}_e \cdot \bar{n}_{e'} = 1$ et $r_{[e,i]} = 1$. Au contraire, dans les zones de forte courbure, $\bar{n}_e \cdot \bar{n}_{e'} = -1$ et $r_{[e,i]} = 0$. Notre objectif est d'avoir un nombre adéquat d'éléments pour avoir une bonne description de l'interface. Ainsi, le segment i de e est supprimable si :

$$r_{[e,i]} > 0.99 \quad (2.15)$$

Connectivité des marqueurs : nous imposons au maillage la contrainte que chaque marqueur $m \in \mathcal{M}$ ait une connectivité (voir section 2.1, page 48) minimale de 4. Avoir une connectivité plus basse (égale à 3) entraînerait des erreurs lors de l'évaluation des propriétés géométriques de l'interface (voir Annexe B). Il est donc nécessaire que le désenrichissement ne franchisse pas cette limite imposée de connectivité des marqueurs. En effet, le désenrichissement supprime une arête et, par voie de conséquence, les éléments qui la partagent. Les marqueurs opposés à cette arête ont leur connectivité baissée de 1. Ainsi, si l'arête i est à supprimer, il faut :

$$\begin{cases} \text{card}(\mathcal{N}_{[1,m_{[e,i]}]}) + \text{card}(\mathcal{N}_{[1,m_{[e,i_0]}]}) - 4 \geq 4 \\ \text{card}(\mathcal{N}_{[1,m_{[e,i_2]}]}) > 4 \text{ avec } i \text{ tel que } e_{[i]} = e' \\ \text{card}(\mathcal{N}_{[1,m_{[e',i_2]}]}) > 4 \text{ avec } i \text{ tel que } e'_{[i]} = e \end{cases} \quad (2.16)$$

En résumé, la somme des connectivités des marqueurs de l'arête à supprimer est supérieure ou égale à 8, et la connectivité de chaque marqueur opposé à cette arête est supérieure stricte à 4.

Éviter la formation d'arêtes trop longues : le désenrichissement ne doit pas générer de travail supplémentaire à la procédure d'enrichissement. Il ne faudrait pas qu'il se forme d'arêtes ayant une longueur supérieure à la limite autorisée h lors du désenrichissement. Nous indiquons par (*) l'état hypothétique où le désenrichissement est effectué sur les critères précédents (Eqs. (2.13), (2.15), (2.16)). La suppression de l'arête i de e entraîne l'effondrement de ses extrémités sur son milieu $\bar{x} = (\bar{x}_{e,i} + \bar{x}_{e,i_0})/2$. En d'autres termes, $\bar{x}_{e,i} = \bar{x}$ et $\bar{x}_{e,i_0} = \bar{x}$. Connaissant le point d'effondrement de l'arête i , les nouvelles distances $d_{e,i}^{(*)}$ peuvent être évaluées sans pour autant modifier le maillage de l'interface. Ainsi, pour éviter la formation d'arêtes trop longues, il faut :

$$\forall e \in \left(\mathcal{N}_{[1,m_{[e,i]}]} \cup \mathcal{N}_{[1,m_{[e,i_0]}]} \right), \forall i \in \llbracket 1, n_e \rrbracket, d_{e,i}^{(*)} < h \quad (2.17)$$

Éviter le renversement des triangles : certaines configurations peuvent entraîner un retournement des triangles lors de la suppression d'arêtes, comme le montre la figure 2.10. Les éléments résultants ont leur normale pointée vers l'intérieur plutôt que vers l'extérieur. Aussi, pour empêcher de telles situations, les normales des éléments entre l'instant $t^{(n)}$ et l'état hypothétique (*) de désenrichissement sont comparées. Ces deux normales doivent pointer vers la même région :

$$\forall e \in \left(\mathcal{N}_{[1,m_{[e,i]}]} \cup \mathcal{N}_{[1,m_{[e,i_0]}]} \right) \setminus \left(\mathcal{N}_{[1,m_{[e,i]}]} \cap \mathcal{N}_{[1,m_{[e,i_0]}]} \right), \bar{n}_e^{(n)} \cdot \bar{n}_e^{(*)} \geq 0 \quad (2.18)$$

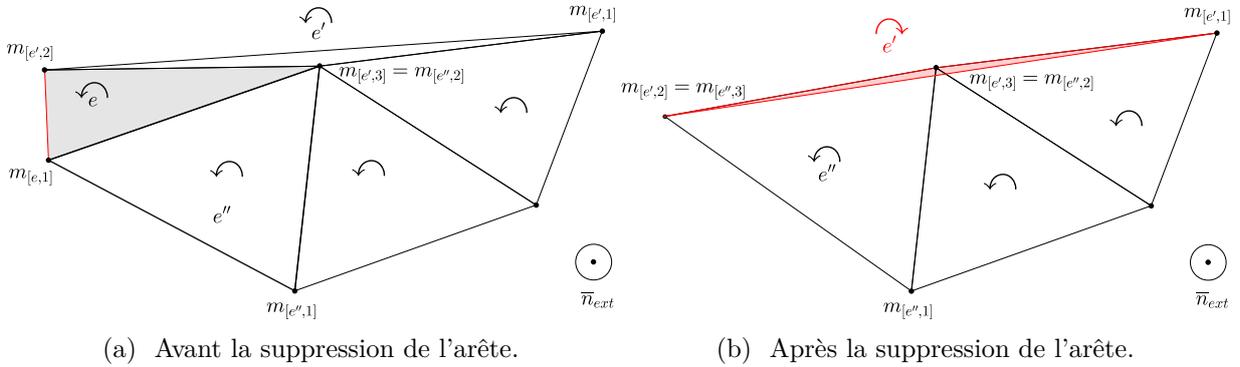


FIGURE 2.10 – L'arête 1 (rouge) de l'élément e remplit les conditions pour être supprimée (a). Les marqueurs des voisins ne changent pas. Seules les coordonnées de $m_{[e',2]}$ et $m_{[e',3]}$ sont changées. Ils ont pour coordonnées le milieu de l'arête 1 de l'ancien élément e . Dans cette configuration, l'élément e' se retrouve renversé, situation qu'il faut éviter (b).

Ainsi, lorsque tous ces critères sont remplis (Eqs. (2.13), (2.15), (2.16), (2.17) et (2.18)), l'arête considérée est supprimée comme illustré sur la figure 2.11.

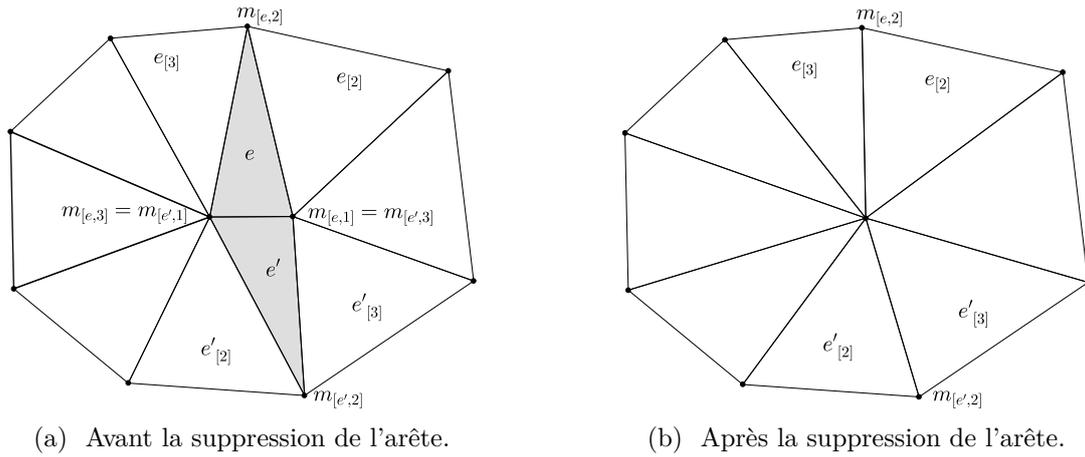


FIGURE 2.11 – L’arête 1 de l’élément e est courte et remplit les conditions pour être supprimer (a). Après la procédure, e et e' sont effacés. Les voisins sont également mis à jour (b).

Les opérations synthétisées dans l’algorithme 2.4 sont alors effectuées.

```

1  $\bar{x} = (\bar{x}_{e,i} + \bar{x}_{e,i_0})/2$  ! Coordonnées du milieu de l’arête  $i$  de  $e$ 
2  $\bar{x}_{e,i} = \bar{x}$  ! Déplacement de  $m_{[e,i]}$  au milieu de l’arête
3 ! Fusion de  $m_{[e,i_0]}$  et  $m_{[e,i]}$ 
4 do  $\forall \tilde{e} \in \mathcal{N}_{[1,m_{[e,i_0]}]}$ 
5      $k = 1$ 
6     do while  $(m_{[\tilde{e},k]} \neq m_{[e,i_0]})$  ! Position de  $m_{[e,i_0]}$  dans  $\tilde{e}$ 
7          $k = k + 1$ 
8     end do
9      $m_{[\tilde{e},k]} = m_{[e,i]}$ 
10 end do
11 ! Mise à jour de  $\mathcal{M}^{(n)}$ ,  $\mathcal{E}^{(n)}$  et  $\mathcal{T}^{(n)}$  et leurs cardinaux
12 Suppression de  $m_{[e,i_0]}$ 
13 Suppression de  $e$  et  $e'$ 
14  $N_{\mathcal{M}}^{(n)} = N_{\mathcal{M}}^{(n)} - 1$  ;  $N_{\mathcal{E}}^{(n)} = N_{\mathcal{E}}^{(n)} - 2$  ;  $N_{\mathcal{T}}^{(n)} = N_{\mathcal{T}}^{(n)} - 2$ 
15 ! Mise à jour de la connectivité des voisins de  $e$  et  $e'$ 
16  $\tilde{e} = e_{[i_2]}$  ;  $\exists k \mid \tilde{e}_{[k]} = e$  ;  $\tilde{e}_{[k]} = e_{[i_0]}$ 
17  $\tilde{e} = e_{[i_0]}$  ;  $\exists k \mid \tilde{e}_{[k]} = e$  ;  $\tilde{e}_{[k]} = e_{[i_2]}$ 
18  $\tilde{e} = e'_{[i_2]}$  ;  $\exists k \mid \tilde{e}_{[k]} = e'$  ;  $\tilde{e}_{[k]} = e'_{[i_0]}$ 
19  $\tilde{e} = e'_{[i_0]}$  ;  $\exists k \mid \tilde{e}_{[k]} = e'$  ;  $\tilde{e}_{[k]} = e'_{[i_2]}$ 

```

Listing 2.4 – Désenrichissement

2.5 Amélioration de la qualité du maillage

Les deux précédentes procédures visent à conserver un nombre adéquat d’éléments pour avoir une bonne description et un bon suivi des changements topologiques de l’interface. Les procédures qui suivent ont pour but d’améliorer la forme des triangles du maillage lagrangien. En effet, l’idée est d’avoir des triangles les plus équilatéraux possibles.

2.5.1 Échange d’arête

L’échange d’arête contribue à cet objectif en homogénéisant la connectivité des marqueurs sur l’ensemble du maillage et en améliorant la qualité des triangles, que nous définirons plus tard.

Le processus est schématisé sur la figure 2.12. Quatre critères sont nécessaires pour échanger les arêtes.

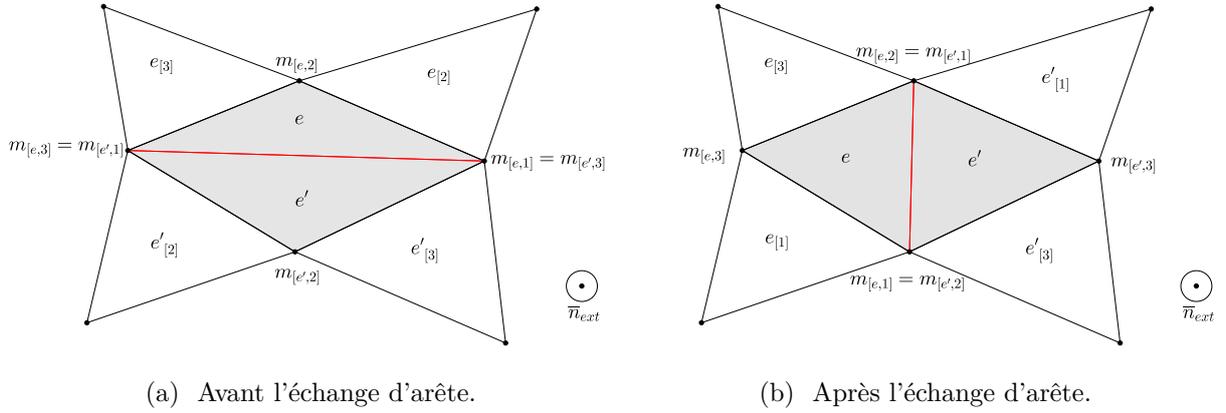


FIGURE 2.12 – L'arête 1 (rouge) de l'élément e est échangée pour rendre les éléments e et e' les plus équilatéraux possibles.

Inclinaison des triangles : l'échange d'arête modifie le volume Ω d'une quantité égale au volume du tétraèdre formé par les marqueurs de e et e' (Fig. 2.13). Or cette modification artificielle doit être limitée car elle va à l'encontre du principe de conservation de la masse. Pour ce faire, nous regardons les normales unitaires \bar{n}_e et $\bar{n}_{e'}$ des éléments voisins e et e' . En effet, la variation de volume est liée à l'inclinaison entre les deux éléments. Ainsi, nous effectuons l'échange d'arêtes que dans des cas de faible inclinaison (2.19).

$$\bar{n}_e \cdot \bar{n}_{e'} \geq \cos(\pi/18) \quad (2.19)$$

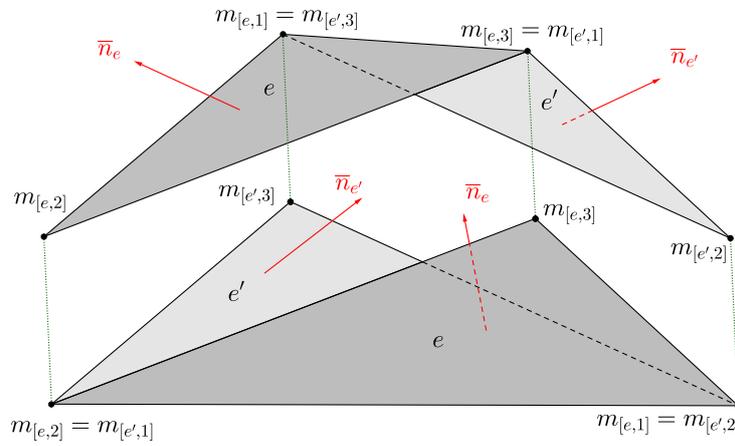


FIGURE 2.13 – Variation de volume engendrée par l'échange d'arête entre les éléments e et e' .

Connectivité des marqueurs : soit i , l'arête à échanger, délimitée par les marqueurs $m_{[e,i]}$ et $m_{[e,i_0]}$. L'échange d'arête baisse la connectivité de $m_{[e,i]}$ et $m_{[e,i_0]}$ de 1, et augmente celle de $m_{[e,i_2]}$ de 1 (Fig. 2.12). Or pour le calcul de la courbure de l'interface, il est préférable d'avoir pour tout $m \in \mathcal{M}$, $\text{card}(\mathcal{N}_{[1,m]} > 4)$ (Annexe B). Il en découle donc la condition (2.20) pour l'arête i de e .

$$\text{card}(\mathcal{N}_{[1,m_{[e,i]}]}) > 4 \text{ et } \text{card}(\mathcal{N}_{[1,m_{[e,i_0]}]}) > 4 \quad (2.20)$$

Éviter le renversement des triangles : Comme mentionné dans la section 2.4, page 56, il faut faire attention au renversement des triangles lors des différentes procédures. En effet,

dans certaines configurations, l'échange d'arête peut entraîner un renversement des triangles. Un exemple est illustré sur la figure 2.14. Après transformation, le triangle e se trouve avec sa

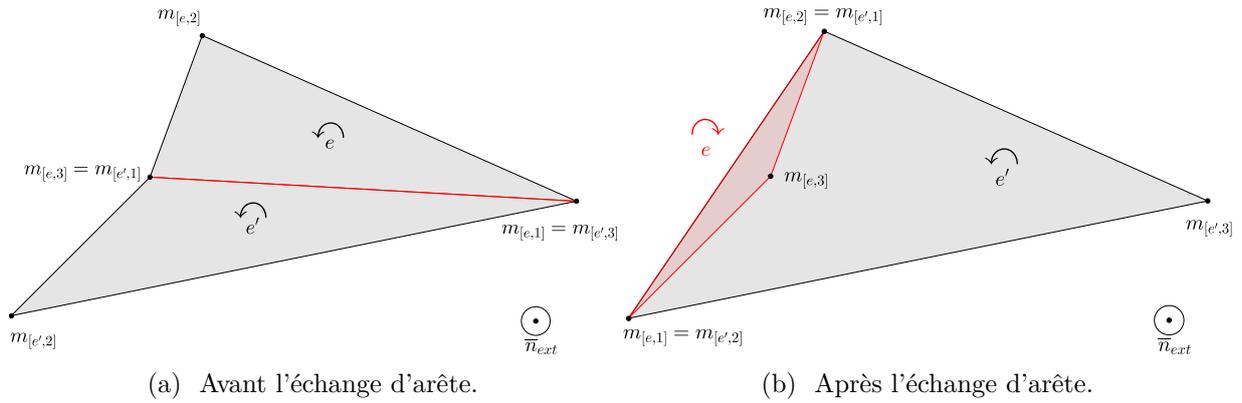


FIGURE 2.14 – L'arête 1 (rouge) de l'élément e est échangée. Le triangle e' voit sa normale inchangée après l'opération. Ce qui n'est pas le cas du triangle e , dont la normale pointe après vers l'intérieur.

normale pointant en sens inverse de la normale extérieure. Cette situation est à éviter. Ainsi, en comparant les normales entre l'instant $t^{(n)}$ et l'état hypothétique $t^{(*)}$ après modification, nous devons avoir :

$$\bar{n}_e^{(n)} \cdot \bar{n}_e^{(*)} > 0 \quad (2.21)$$

Qualité des triangles : le dernier critère concerne la qualité Q_e des triangles. Elle quantifie le fait qu'un triangle est plus ou moins équilatéral. Définie de diverses façons, nous choisissons celle proposée par ROGHAIR et al. [99]. Cette définition se base sur des grandeurs facilement accessibles, à savoir les longueurs des arêtes. Elle se calcule en faisant le rapport entre le diamètre du cercle inscrit D_i et le rayon du cercle circonscrit R_c :

$$Q_e = D_i/R_c \quad (2.22)$$

Pour l'élément $e \in \mathcal{E}$, elle peut se réécrire en se servant des longueurs $d_{e,i}$ de ses arêtes (voir section 2.1, page 47), avec $i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket$:

$$Q_e = \frac{(d_{e,1} + d_{e,2} - d_{e,3}) \times (d_{e,2} + d_{e,3} - d_{e,1}) \times (d_{e,3} + d_{e,1} - d_{e,2})}{d_{e,1} \times d_{e,2} \times d_{e,3}} \quad (2.23)$$

Ainsi, quand le triangle e est équilatéral, toutes les longueurs sont égales et $Q_e = 1$. A l'inverse, dans le cas d'un triangle plat, le côté le plus long est égal à la somme des deux autres. Le numérateur s'annule donc et $Q_e = 0$. Un des objectifs de l'échange d'arête est de pouvoir améliorer cette qualité. Soient e et e' , les deux triangles devant échanger une arête. La moyenne de leur qualité après opération doit être supérieure à celle avant l'échange :

$$\left[\left(Q_e^{(*)k} + Q_{e'}^{(*)k} \right) / 2 \right]^{1/k} > \left[\left(Q_e^{(n)k} + Q_{e'}^{(n)k} \right) / 2 \right]^{1/k} \quad (2.24)$$

Notre choix s'est portée pour une moyenne harmonique ($k = -1$).

Ainsi, lorsque toutes les conditions sont réunies Eqs. (2.19), (2.20), (2.21), (2.24), nous échangeons les arêtes de e et e' et mettons à jour les voisins. Les différentes étapes sont schématisées dans l'algorithme 2.5.

```

1  $\hat{e} = e$  ! Création temporaire de  $\hat{e}$  pour stocker  $e$ 
2  $\hat{e}' = e'$  ! Création temporaire de  $\hat{e}'$  pour stocker  $e'$ 
3 ! Échange de l'arête  $i$  entre les voisins  $e$  et  $e'$ 
4  $m_{[e,i]} = m_{[\hat{e}',i_2]}$ 
5  $m_{[e',i]} = m_{[\hat{e},i_2]}$ 
6 ! Mise à jour de la connectivité de  $e$  et  $e'$ 
7  $e_{[i]} = \hat{e}'_{[i_2]}$  ;  $e_{[i_2]} = e'$ 
8  $e'_{[i]} = \hat{e}_{[i_2]}$  ;  $e'_{[i_2]} = e$ 
9 ! Mise à jour de la connectivité des voisins de  $e$  et  $e'$ 
10  $\tilde{e} = \hat{e}_{[i_2]}$  ;  $\exists k \mid \tilde{e}_{[k]} = \hat{e}$  ;  $\tilde{e}_{[k]} = e'$ 
11  $\tilde{e} = \hat{e}'_{[i_2]}$  ;  $\exists k \mid \tilde{e}_{[k]} = \hat{e}'$  ;  $\tilde{e}_{[k]} = e$ 
12 ! Suppression des éléments de stockage
13 Suppression de  $\hat{e}$  et  $\hat{e}'$ 

```

Listing 2.5 – Échange d'arête

2.5.2 Lissage

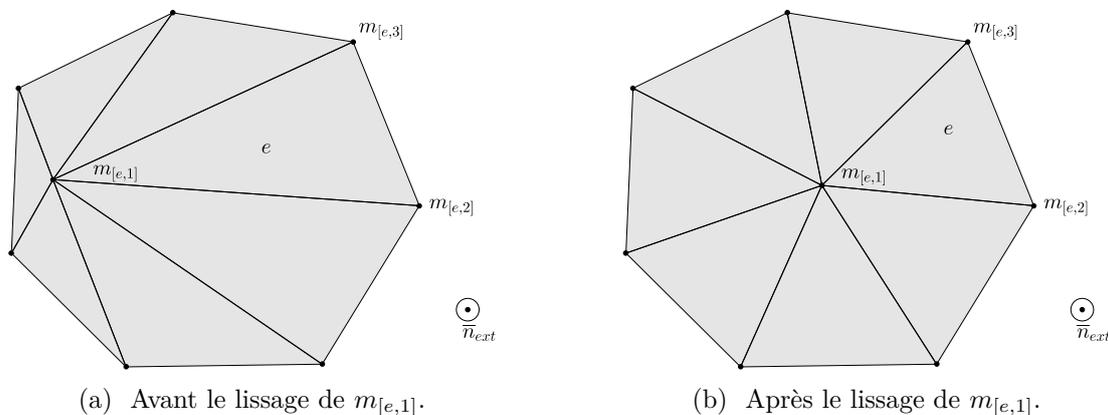
Toujours pour améliorer la régularité du maillage de l'interface, nous avons mis en place une procédure de lissage. Cette dernière peut se faire point par point, arête par arête ou une combinaison des deux, comme présenté par KUPRAT et al. [59]. Nous avons opté pour un lissage laplacien, point par point. Soit $m \in \mathcal{M}$, de coordonnées \bar{x} . Nous considérons son premier voisinage, $\mathcal{N}_{[1,m]}$, de cardinal $\text{card}(\mathcal{N}_{[1,m]})$. Nous supposons également que m occupe la même place i dans tout élément $e \in \mathcal{N}_{[1,m]}$. En d'autres termes :

$$\forall e \in \mathcal{N}_{[1,m]}, m_{[e,i]} = m$$

Cela est possible car, pour $n_e = 3$, le choix du premier marqueur de e est arbitraire. La nouvelle position de m après lissage est donc donnée par l'équation (2.25).

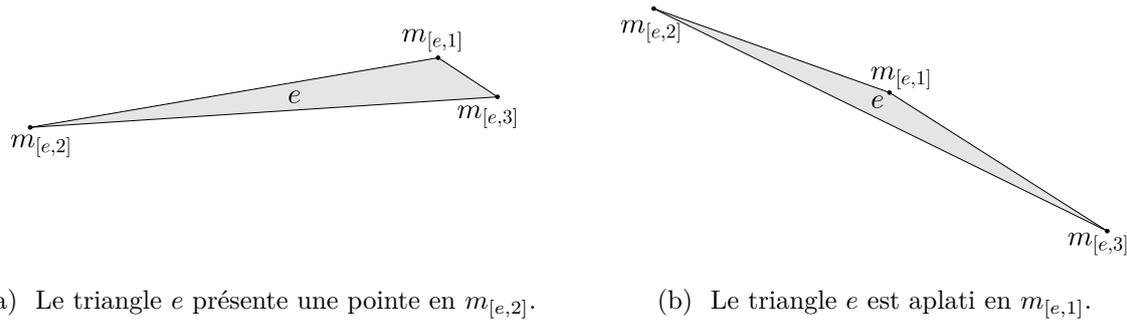
$$\forall m \in \mathcal{M}, \bar{x} = \frac{1}{2 \times \text{card}(\mathcal{N}_{[1,m]})} \sum_{e \in \mathcal{N}_{[1,m]}} \sum_{\substack{j \in [1,3] \\ j \neq i}} \bar{x}_{e,j} \quad (2.25)$$

En d'autres termes, le marqueur m est placé au barycentre des marqueurs constituant son premier voisinage, comme présenté sur la figure 2.15.

FIGURE 2.15 – Le lissage met $m_{[e,1]}$ au barycentre des marqueurs de son premier voisinage.

2.5.3 Suppression de mauvais triangles

Afin de s'assurer que le maillage de l'interface est relativement de bonne qualité, une procédure supplémentaire est implémentée. Elle se focalise essentiellement sur deux types de triangles, qui peuvent restés dans le maillage malgré l'application des précédentes procédures. Nous distinguons ainsi d'une part les triangles en aiguille et les triangles plats d'autre part. Une illustration de ces deux types de triangles est présentée sur la figure 2.16. Le traitement effectué est différent selon la nature du triangle. Nous désignons par $\theta_{e,i}$ l'angle formé au marqueur $m_{[e,i]}$ de l'élément e .



(a) Le triangle e présente une pointe en $m_{[e,2]}$.

(b) Le triangle e est aplati en $m_{[e,1]}$.

FIGURE 2.16 – Un élément en aiguille (a) et un élément plat (b) à retirer du maillage lagrangien.

Triangle plat : un élément plat possède un angle largement supérieur aux deux autres, résultant ainsi en une forme de chapeau. Un élément e est considéré comme plat s'il vérifie la relation (2.26).

$$\max_{i \in \llbracket 1,3 \rrbracket} (\theta_{e,i}) \geq 8\pi/9 \quad (2.26)$$

Dans ce cas, un échange d'arête est opéré (Algo. 2.5), avec seulement les critères (2.20) et (2.21) pris en compte.

Triangle en aiguille : un élément e est qualifié d'aiguille si son plus petit angle est négligeable devant les deux autres, formant ainsi une pointe. De plus, sa plus petite arête est négligeable face à son arête la plus longue. La relation (2.27) permet de qualifier un élément $e \in \mathcal{E}$ de triangle en aiguille.

$$\min_{i \in \llbracket 1,3 \rrbracket} (\theta_{e,i}) \leq 8\pi/9 \quad \text{et} \quad \min_{i \in \llbracket 1,3 \rrbracket} (d_{e,i}) / \max_{i \in \llbracket 1,3 \rrbracket} (d_{e,i}) \leq 0.3 \quad (2.27)$$

L'attitude adoptée est le désenrichissement de l'élément e (Algo. 2.4) en respectant seulement les conditions définies par les relations (2.16) et (2.18).

2.6 Conservation du volume

L'écoulement étant incompressible, nous devons nous assurer de la conservation du volume Ω au cours du temps. Pour cela, il nous faut le calculer à partir de la connaissance du maillage de l'interface.

Le volume discret $\mathcal{V}^{(n)}$ délimité par l'interface $\partial\Omega$ peut être décomposé en plusieurs sous-volumes $\mathcal{V}_e^{(n)}$, contenus dans des tétraèdres. En effet, ces tétraèdres sont constitués des triangles de l'interface et d'un point de référence. Ce point ne doit pas être trop éloigné des marqueurs de l'interface pour avoir des grandeurs du même ordre lors du calcul des volumes. Nous utilisons

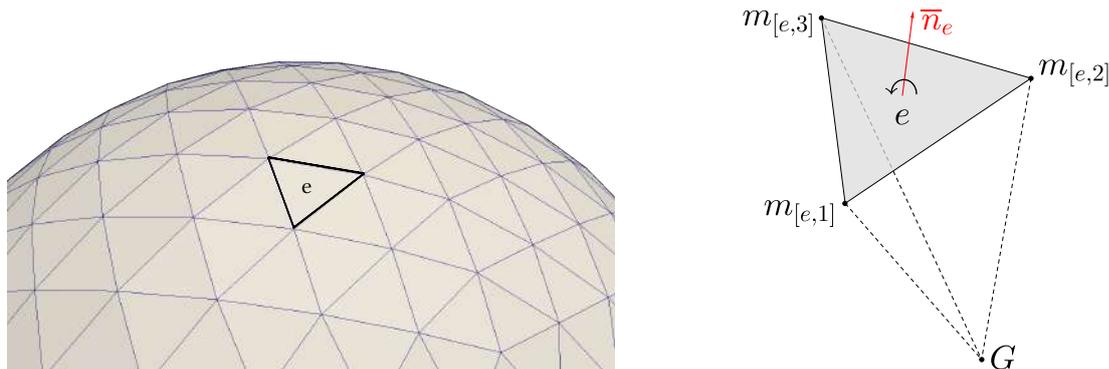


FIGURE 2.17 – Le volume se calcule en faisant la somme des volumes des tétraèdres construits à partir des triangles de l'interface et d'un point de référence.

le barycentre G des marqueurs de l'interface, de coordonnées \bar{x}_G (Eq. (2.28)), comme point de référence pour construire les tétraèdres (Fig. 2.17). Celui-ci est facile d'accès. Une alternative serait le centre géométrique ou de masse des marqueurs de l'interface.

$$\bar{x}_G = \frac{1}{\text{card}(\mathcal{M})} \sum_{m \in \mathcal{M}} \bar{x}_m \quad (2.28)$$

Ainsi, le volume algébrique du tétraèdre, construit à partir de l'élément e et du barycentre G , est :

$$\mathcal{V}_e^{(n)} = \left((\bar{x}_{e,1}^{(n)} - \bar{x}_G) \wedge (\bar{x}_{e,2}^{(n)} - \bar{x}_G) \right) \cdot (\bar{x}_{e,3}^{(n)} - \bar{x}_G) / 6 \quad (2.29)$$

Nous en déduisons le volume de la bulle à l'instant t^n :

$$\mathcal{V}^{(n)} = \sum_{e \in \mathcal{E}^{(n)}} \mathcal{V}_e^{(n)} \geq 0 \quad (2.30)$$

Afin de conserver le volume, les marqueurs vont être déplacés. Ce déplacement se fait dans la direction de la normale à l'interface, proportionnellement à la vitesse de celle-ci. Ainsi, pour un marqueur $m_{[e,i]}$, de vitesse $\bar{v}_{e,i}$, de normale unitaire $\bar{n}_{e,i}$, le déplacement se fait proportionnellement au vecteur :

$$\bar{dl}_{e,i} = |\bar{v}_{e,i} \cdot \bar{n}_{e,i}| \bar{n}_{e,i} \quad (2.31)$$

Ainsi, en notant (*) l'état de l'interface avec la correction de volume, la nouvelle position de tout marqueur $m_{[e,i]}$ est :

$$\bar{x}_{e,i}^{(*)} = \bar{x}_{e,i}^{(n)} + \alpha \times \bar{dl}_{e,i}^{(n)}, \text{ avec } \alpha \in \mathbb{R} \quad (2.32)$$

Déterminer α permet de trouver la correction à apporter à chaque marqueur pour conserver le volume. La recherche de α se fait en réécrivant le volume \mathcal{V} après correction de la position des marqueurs. Ainsi, en considérant l'élément e , le volume du tétraèdre après correction s'écrit :

$$\mathcal{V}_e^{(*)} = \mathcal{V}_e^{(n)} + (A_e \alpha^3 + B_e \alpha^2 + C_e \alpha) / 6 \quad (2.33)$$

Les coefficients A_e , B_e , C_e sont égaux à :

$$\begin{aligned} A_e &= \left(\bar{dl}_{e,1}^{(n)} \wedge \bar{dl}_{e,2}^{(n)} \right) \cdot \bar{dl}_{e,3}^{(n)} \\ B_e &= \left(\bar{dl}_{e,2}^{(n)} \wedge \bar{dl}_{e,3}^{(n)} \right) \cdot (\bar{x}_{e,1}^{(n)} - \bar{x}_G) + \left(\bar{dl}_{e,3}^{(n)} \wedge \bar{dl}_{e,1}^{(n)} \right) \cdot (\bar{x}_{e,2}^{(n)} - \bar{x}_G) + \\ &\quad \left(\bar{dl}_{e,1}^{(n)} \wedge \bar{dl}_{e,2}^{(n)} \right) \cdot (\bar{x}_{e,3}^{(n)} - \bar{x}_G) \\ C_e &= \left((\bar{x}_{e,2}^{(n)} - \bar{x}_G) \wedge (\bar{x}_{e,3}^{(n)} - \bar{x}_G) \right) \cdot \bar{dl}_{e,1}^{(n)} + \left((\bar{x}_{e,3}^{(n)} - \bar{x}_G) \wedge (\bar{x}_{e,1}^{(n)} - \bar{x}_G) \right) \cdot \bar{dl}_{e,2}^{(n)} + \\ &\quad \left((\bar{x}_{e,1}^{(n)} - \bar{x}_G) \wedge (\bar{x}_{e,2}^{(n)} - \bar{x}_G) \right) \cdot \bar{dl}_{e,3}^{(n)} \end{aligned} \quad (2.34)$$

Le volume délimité par l'interface est alors :

$$\mathcal{V}^{(*)} = \mathcal{V}^{(n)} + (A\alpha^3 + B\alpha^2 + C\alpha) / 6 \quad (2.35)$$

avec

$$A = \sum_{e \in \mathcal{E}^{(n)}} A_e, \quad B = \sum_{e \in \mathcal{E}^{(n)}} B_e, \quad C = \sum_{e \in \mathcal{E}^{(n)}} C_e \quad (2.36)$$

La conservation du volume s'écrit donc :

$$\mathcal{V}^{(*)} = \mathcal{V}^{(0)} \iff A\alpha^3 + B\alpha^2 + C\alpha + 6\mathcal{V}^{(n)} - 6\mathcal{V}^{(0)} = 0 \quad (2.37)$$

L'inconnue α est donc solution d'une équation polynomiale de degré 3. Cette équation non-linéaire peut être résolue de manière itérative par une méthode de Newton ou de manière directe par la méthode de Cardan (voir Annexe A). Après la résolution de l'équation, trois solutions se présentent à nous. La solution α_0 que nous retenons est la solution réelle la plus petite en valeur absolue. Ainsi, grâce à cette méthode, nous pouvons contrôler de manière exacte le volume discret délimité par le maillage de l'interface.

2.7 Validation - Interface sphérique dans un champ tourbillonnaire

Ce test a été proposé par LEVEQUE [65] et repris par ENRIGHT et al. [30]. Toutes les longueurs sont adimensionnées par la taille du domaine de simulation. Ainsi, dans une boîte cubique de côté $[0, 1]^3$ est placé une interface sphérique de rayon 0.15 et de centre (0.35, 0.35, 0.35). Elle est soumise à un champ de vitesse à divergence nulle définie comme suit :

$$\begin{aligned} u(x, y, z, t) &= 2 \sin^2(\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z) \cos(\pi t/T) \\ v(x, y, z, t) &= -\sin(2\pi x) \sin^2(\pi y) \sin(2\pi z) \cos(\pi t/T) \\ w(x, y, z, t) &= -\sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin^2(\pi z) \cos(\pi t/T) \end{aligned} \quad (2.38)$$

avec, $T = 3$. Cet écoulement engendre une déformation à la fois dans les plans $(x; y)$ et $(x; z)$. Ce champ est temporellement périodique et réversible. Ainsi, à $t = T/2$, le champ de vitesse s'annule et l'interface est au maximum de sa déformation. Le champ de vitesse change alors de sens, ramenant l'interface à sa position initiale à $t = T$.

D'abord, nous effectuons des tests de nature qualitative. En effet, nous essayons dans un premier temps d'avoir des interfaces graphiquement semblables à celles présentes dans la littérature [30, 44]. Sur la figure 2.18, différents instants du maillage de l'interface au cours de son transport sont illustrés. La boîte cubique possède 80 cellules par direction, résultant en un pas d'espace $h = 1/80$. Le pas de temps est $\Delta t = 10^{-3}$. Graphiquement, nous obtenus des résultats très satisfaisant, quand nous les comparons à ceux de ENRIGHT et al. [30], qui utilisent la méthode 'semi-Lagrangian particle level set', avec un pas d'espace effectif $h = 1/512$ (Fig.2.19).

La suite des tests s'est portée sur un volet beaucoup plus quantitatif. En effet, nous nous sommes intéressés à la convergence spatiale de la position des marqueurs de l'interface en fonction de la discrétisation de la boîte cubique. En effet, nous rappelons que la longueur d des arêtes des éléments du maillage de l'interface est liée à la taille h des cellules de la boîte cubique (voir relations (2.11) et (2.13)).

$$h/4 < d < h$$

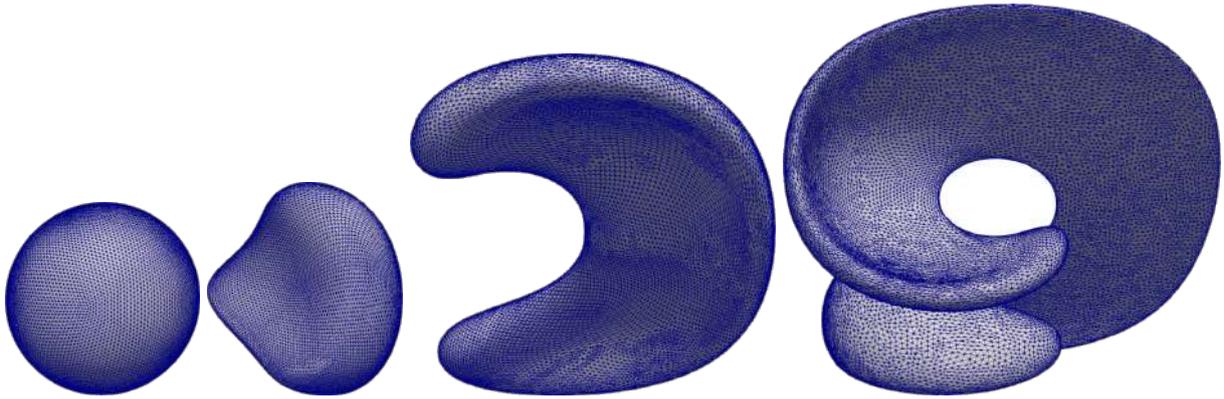


FIGURE 2.18 – Évolution d’une interface sphérique dans un champ tourbillonnaire, avec $\Delta t = 10^{-3}$ et $h = 1/80$. De gauche à droite, l’interface est représentée aux instants 0, $T/10$, $T/5$ et $T/2$, le maximum de déformation.

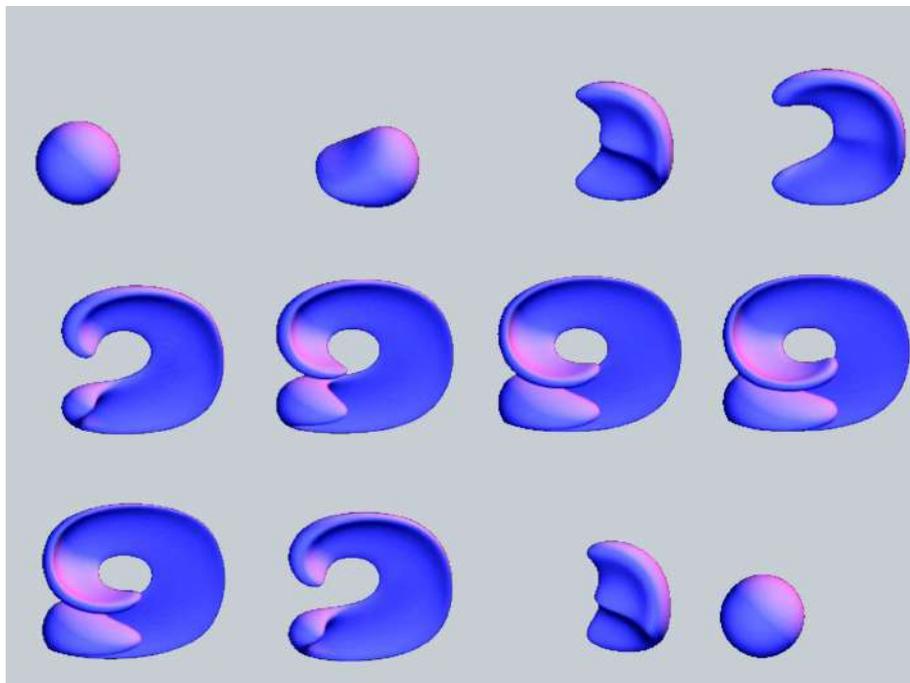


FIGURE 2.19 – Différents instants de l’interface à 0, $T/15$, $2T/15$, $3T/15$, $4T/15$, $5T/15$, $6T/15$, $7T/15$, $9T/15$, $11T/15$, $13T/15$ et T , tirés de [30].

Pour cela, il nous faut mesurer l’écart entre notre solution numérique discrète et la solution de référence. N’ayant pas de solution analytique de référence pour le calcul des erreurs, nous avons donc construits une solution de référence numérique, obtenue pour un pas d’espace $h_{ref} = 1/640$ et un pas de temps $\Delta t_{ref} = 10^{-4}$. Ainsi, pour tout marqueur $m \in \mathcal{M}$, cet écart mesure le rayon de la plus petite boule centrée en m et qui touche l’interface de référence (Fig. 2.20).

Nous notons I_m le point de contact associé au marqueur $m \in \mathcal{M}$, de coordonnées \bar{x}_{I_m} . Ce point vérifie la relation suivante :

$$I_m = \operatorname{argmin}_{P \in \partial\Omega_{ref}} \|\bar{x}_m - \bar{x}_P\|$$

Nous pouvons donc écrire que cet écart, noté r_m , est égal à :

$$r_m = \|\bar{x}_m - \bar{x}_{I_m}\| \quad (2.39)$$

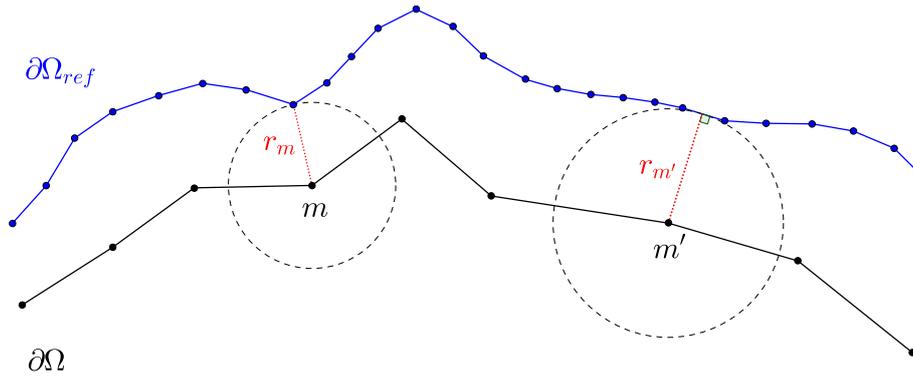


FIGURE 2.20 – Écart entre un marqueur du maillage grossier et l'interface du maillage de référence.

Plus concrètement, r_m est la plus petite des distances euclidiennes entre $m \in \mathcal{M}$ et tout élément $e \in \mathcal{E}_{ref}$. Trouver ce point de contact I_m pour évaluer r_m se fait en deux étapes.

Trouver les éléments $e \in \mathcal{E}_{ref}$ les plus proches de $m \in \mathcal{M}$: Parcourir tous les éléments $e \in \mathcal{E}_{ref}$ pour trouver I_m associé à $m \in \mathcal{M}$ est prohibitif. Soit le marqueur $m \in \mathcal{M}$ localisé dans la cellule d'indices (i_0, j_0, k_0) . Nous recherchons de manière itérative les couronnes, autour de la cellule initiale, qui contiennent des éléments de \mathcal{E}_{ref} . Ainsi, nous regardons dans les cellules d'indices $(i_0 \pm i, j_0 \pm j, k_0 \pm k)$, avec $(i, j, k) \in \mathbb{N}^3$. Tant qu'aucun élément $e \in \mathcal{E}_{ref}$ n'est rencontré, i, j et k sont incrémentés de 1. Lorsque la première couronne contenant des éléments $e \in \mathcal{E}_{ref}$ est trouvée, nous prenons également la couronne suivante pour nous assurer d'avoir la bonne distance. En effet, comme le montre la figure 2.21, il peut se trouver des situations où l'écart minimal se localise sur la couronne d'après.

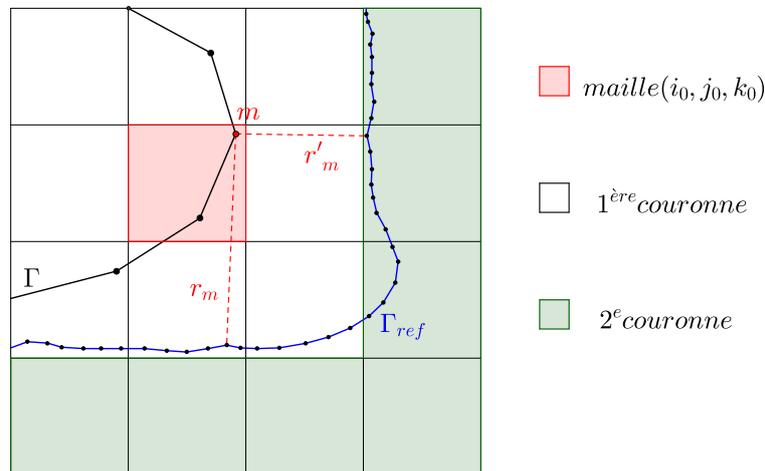


FIGURE 2.21 – Le marqueur m se trouve dans la cellule (i_0, j_0, k_0) . Les premiers éléments $e \in \mathcal{E}_{ref}$ rencontrés sont localisés dans la première couronne (zone blanche). Cependant, la distance r_m établie avec ces éléments est plus grande que celle construite avec les éléments de la deuxième couronne (zone verte), r'_m .

Projection orthogonal du marqueur m sur le plan contenant l'élément $e \in \mathcal{E}_{ref}$: nous notons H le projeté orthogonal du marqueur m sur le plan (\mathcal{P}_e) contenant l'élément $e \in \mathcal{E}_{ref}$. La position de $H \in (\mathcal{P}_e)$ par rapport à l'élément e nous permet de déterminer I_m , et donc la distance euclidienne entre le marqueur m et l'élément e . Trois résultats sont possibles, comme l'illustre la figure 2.22. Nous distinguons trois zones :

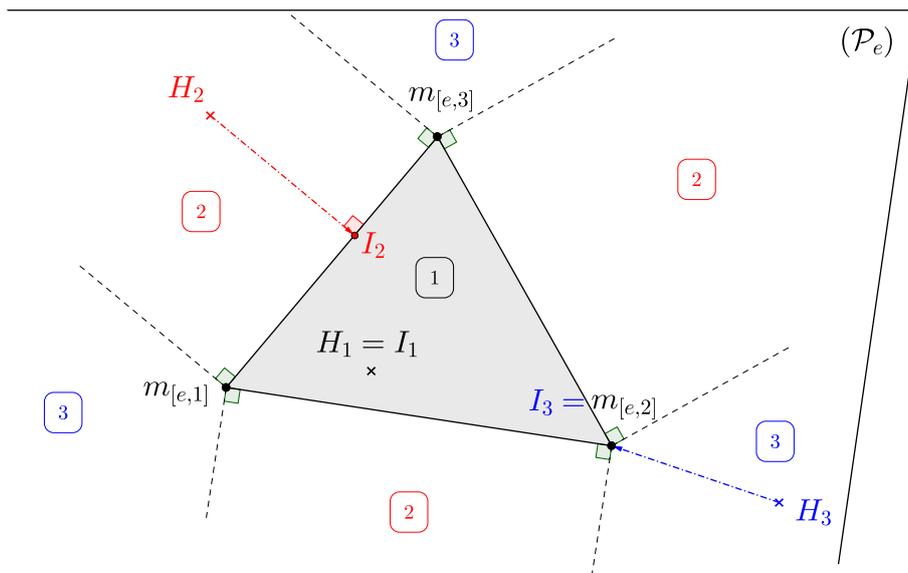


FIGURE 2.22 – Le point d’intersection entre la droite partant de m , de vecteur directeur n_e , et la plan (\mathcal{P}_e) peut se trouver dans trois différentes zones. S’il est dans la zone 1 (intérieur de e), alors $I = H_1$. S’il est dans la zone 2, alors $I =$ projeté orthogonal de H_2 sur l’arête. Dans la zone 3, I est un sommet de e . H_3 est proche de $m_{[e,2]}$ donc $I = m_{[e,2]}$.

- zone 1 : c’est l’intérieur de l’élément e . Dans ce cas, $I = H_1$.
- zone 2 : ce sont les 3 régions du plan, à l’extérieur de e , comprises entre les 2 droites perpendiculaires aux 3 arêtes, passant par leurs extrémités (Fig. 2.22). Dans cette situation, I est le projeté orthogonale de H_2 sur l’arête la plus proche.
- zone 3 : ce sont les 3 régions du plan, comprises entre les 2 droites perpendiculaires à 2 arêtes adjacentes et passant par leur extrémité commune. Dans ces parties, I correspond au sommet de e le plus proche. Ainsi, sur la figure 2.22, $I = m_{[e,2]}$.

De la mesure de la distance des marqueurs m à la surface de référence $\partial\Omega_{ref}$, nous pouvons construire une mesure des erreurs en norme L_2 et L_∞ , présentée dans l’équation (2.40).

$$Err_2(h) = \left(\sum_{m \in \mathcal{M}} r_m^2 / N_{\mathcal{M}} \right)^{1/2}, \quad Err_\infty(h) = \max_{m \in \mathcal{M}} r_m \quad (2.40)$$

La figure 2.23 présente l’évolution de l’erreur entre l’interface $\partial\Omega(h)$ et $\partial\Omega_{ref}$ pour 2 normes, à $t = T/2$. Nous observons une convergence à l’ordre 2 pour $Err_2(h)$. La convergence tombe à 1 quand nous nous intéressons à $Err_\infty(h)$. Nous constatons qu’avec l’ensemble de nos procédures pour gérer le maillage de l’interface lors de son transport et de sa déformation, nous arrivons à avoir une bonne précision sur la position des marqueurs. De plus, l’ordre 2 constaté sur $Err_2(h)$ nous permet de pouvoir réduire l’erreur spatiale sur les marqueurs. Ainsi, en divisant par 2 la taille de la grille eulérienne, nous divisons par 4 l’erreur sur la position des marqueurs.

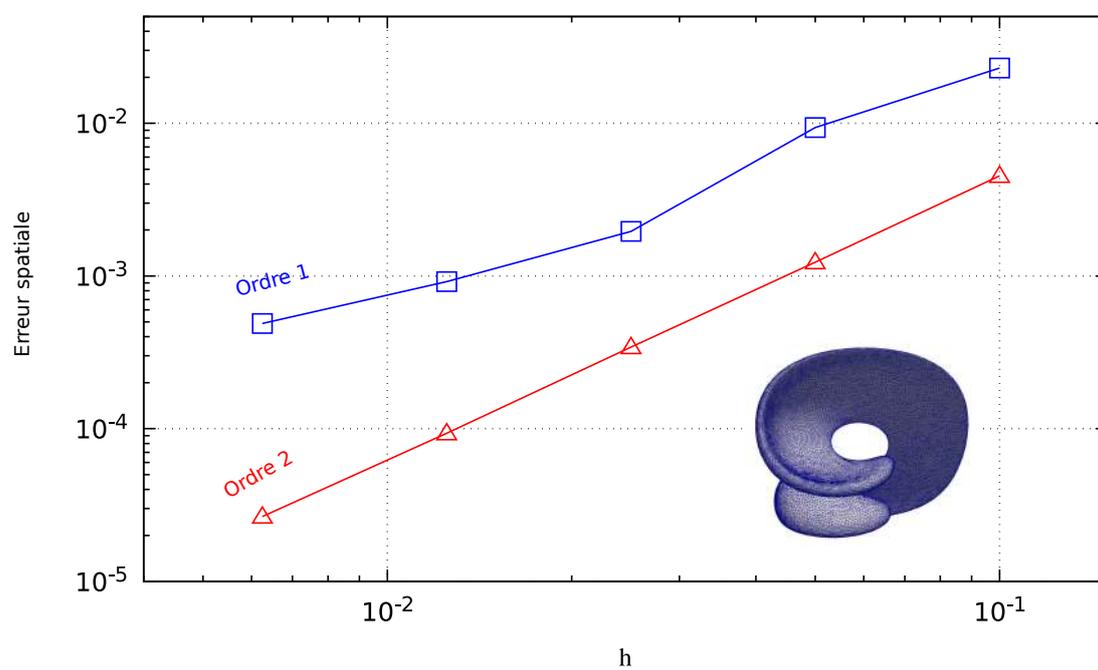


FIGURE 2.23 – Erreurs spatiales en norme L_2 (triangle) et L_∞ (carré) en fonction de la taille h des cellules de discrétisation du domaine.

Bibliographie

Gestion du maillage de l'interface

- [30] D. ENRIGHT, F. LOSASSO et R. FEDKIW. “A Fast and Accurate Semi-Lagrangian Particle Level Set Method”. In : *Computers & Structures* 83.6 (fév. 2005), p. 479-490 (cf. p. 50, 63, 64, 145).
- [33] M. FEBRES et D. LEGENDRE. “Enhancement of a 2D front-tracking algorithm with a non-uniform distribution of Lagrangian markers”. In : *J. Comput. Phys.* 358 (2018), p. 173-200 (cf. p. 55).
- [44] J. P. GOIS, A. NAKANO, L. G. NONATO et G. C. BUSCAGLIA. “Front tracking with moving-least-squares surfaces”. In : *J. Comput. Phys.* 227 (2008), p. 9643-9669 (cf. p. 63).
- [59] KUPRAT, ANDREW, KHAMAYSEH, AHMED, GEORGE, DENISE, LARKEY et LEVI. “Volume Conserving Smoothing for Piecewise Linear Curves, Surfaces, and Triple Lines”. In : *J. Comput. Phys.* 172.1 (sept. 2001), p. 99-118 (cf. p. 60).
- [65] R. J. LEVEQUE. “High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flows”. In : *SIAM J. Numer. Anal.* 33.2 (avr. 1996), p. 627-665 (cf. p. 50, 63, 145).
- [74] R. MCDERMOTT et S. POPE. “The parabolic edge reconstruction method (PERM) for Lagrangian particle advection”. In : *J. Comput. Phys.* 227.11 (2008), p. 5447-5491 (cf. p. 49, 89, 92, 94).
- [99] I. ROGHAI, V. S. ANNALAND et J. KUIPERS. “An improved Front-Tracking technique for the simulation of mass transfer in dense bubbly flows”. In : *Chem. Eng. Sci.* 152 (oct. 2016), p. 351-369 (cf. p. 50, 55, 59, 89).
- [118] M. TAVARES, D.-A. KOFFI BI, E. CHENIER et S. VINCENT. “A Two-Dimensional Second Order Conservative Front-Tracking Method with an Original Marker Advection Approach Based on Jump Relations”. In : *Communications in Computational Physics* 27.5 (2020), p. 1550-1589 (cf. p. 37, 45).
- [120] D. J. TORRES et J. U. BRACKBILL. “The Point-Set Method : Front-Tracking without Connectivity”. In : *J. Comput. Phys.* 165 (2000), p. 620-644 (cf. p. 29, 30, 47).

Chapitre 3

Accuracy and convergence of the curvature and normal vector discretizations for 3D static and dynamic front-tracking interfaces

Sommaire

3.1	Introduction	72
3.2	Num. methods for eval. κ, \mathbf{n} and \mathbf{f}	74
3.2.1	Main mathematical notations	74
3.2.2	Discretization of the Laplace-Beltrami Operator (LBO-methods)	75
3.2.3	Integral Formulation of the surface tension (IF-methods)	76
3.2.4	Surface Reconstruction (SR-methods)	78
3.2.5	Discrete surfaces and solution accuracy	79
3.3	Analysis of a stationary surface	80
3.3.1	Results	81
3.3.2	Comparisons	85
3.3.3	Summary	87
3.4	Analysis of advected surfaces	88
3.4.1	Problem presentation	88
3.4.2	Ligament formation – Case $Q < 0$	90
3.4.3	Bubble shape – Case $Q > 0$	93
3.4.4	Summary	96
3.5	Conclusion	96

Désir-André Koffi-Bi ¹, Mathilde Tavares, Éric Chénier, Stéphane Vincent

MSME, Univ Gustave Eiffel, CNRS UMR 8208, Univ Paris Est Creteil, F-77474
Marne-la-Vallée, France

Abstract :

In this work, three classes of numerical methods are investigated to evaluate the mean curvature, the unit normal vector and the surface tension on a front tracking interface encountered in the simulation of multiphase flows with separated phases. The Laplace-Beltrami Operator discretization, the Integral Formulation of the surface tension and the Surface Reconstruction technique are well-known methods used in the literature, but whose accuracy, robustness and convergence properties are seldom studied. In a first step, different variants of these methods are presented and compared against each other on a static analytical surface to measure their sensitivity to the size and regularity of the mesh. Then, to assess the influence of the surface advection scheme and the remeshing procedures, two original and time dependent analytical surfaces have been developed, leading to a ligament formation or the birth of a drop/bubble on a flat surface/liquid film. Comparisons to such dynamical surfaces are especially useful and significant, since they highlight the sensitivity of numerical methods for the interface property calculation to the errors produced by the Lagrangian transport of the front-tracking surface. Finally, the accuracy of the different approximations are correlated to their computation time, so that the user may choose the most appropriate method according to the desired accuracy and cost.

Keywords : Front-tracking, multiphase flow, surface tension, curvature

3.1 Introduction

Multiphase flows are very common in industry and natural environment. Amongst the numerous examples, it can be mentioned the heat and mass transfer for safety issues in nuclear power plants or for the control of the chemical composition in alloy manufacturing, or also the liquid atomization, either of fuel in engines to reduce pollutants generated by combustion [13], or of sea water resulting from the breaking wave to understand the coupling between the ocean and the atmosphere for meteorology purpose. For these flows, the heat and mass transfers result from the energy and momentum balances in each phase, but also from the physics at the interface which is governed by the jump conditions [21]

$$[\rho(\mathbf{u} - \mathbf{V}_i)] \cdot \mathbf{n} = \dot{m} \quad (3.1)$$

$$\left[-\dot{m}\mathbf{u} - p\mathbf{n} + \mu\mathbf{n} \cdot \left(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^t \right) \right] = \sigma\kappa\mathbf{n} + (\nabla\sigma) \quad (3.2)$$

$$[\lambda \cdot \nabla T] \cdot \mathbf{n} = \dot{m}L_f \quad (3.3)$$

where $[\bullet]$ stands for the difference of the quantity \bullet on both sides of the interface, in the direction of the unit normal vector to the interface \mathbf{n} , pointing outward. It is worth noticing that the forces and fluxes acting at the interface depend on the one hand, to fluid flow parameters, such

1. desir-andre.koffi-bi@univ-eiffel.fr

as the fluid velocities \mathbf{u} , the velocity of the interface \mathbf{V}_i , the pressures p , the temperatures T , the densities ρ , the kinematic viscosities μ , the surface tension σ and the latent heat L_f , on the other hand to geometrical properties such as twice the mean curvature κ and the unit normal vector \mathbf{n} to the interface.

Since the shape of the interfaces, allowing the calculation of κ and \mathbf{n} , is one of the very important parameters to control the heat and mass transfers, the numerical models must be able to approximate it accurately. However, such a task can turn out to be very difficult, especially when a large range of interfacial scales have to be modelled. For example, in the atomization process, the cascade of interface scales must be solved, which requires a very expensive mesh refinement : the initial breakup of the continuous liquid phase gives rise to individual liquid parcels before producing a dispersed spray. Even though the establishment of the drop size distribution was successfully described by macro- or meso-scale models with ELSA or CEDRE solvers [22, 139], these descriptions are only valid once the spray is formed. Therefore, the primary atomization is still poorly understood and needs new modelling strategies. Computing the curvature and more generally the surface properties also arise in boundary integral methods where volumetric problems are transformed into surface problems [136].

The understanding and the control of the heat and mass transfer in multiphase flows also requires that we distinguish the different interface shapes. Thanks to the databases stemming from CLS-VOF schemes [125], Massot and co-workers [13, 77] have been able to propose new ways to analyse the interface dynamics during primary atomization. They have demonstrated that each type of structure (spheres, ligaments or sheets) is characterized by specific distributions of the interface curvature. Therefore, an accurate numerical evaluation of the interface curvature is essential to ensure the reliability of the results.

In our contribution, we are interested in the numerical evaluation of the topological properties of interfaces, namely the mean curvature κ and the unit normal vector \mathbf{n} , but also the surface tension \mathbf{f} . Depending on the model being used, the capillary effects are either introduced in the Navier-Stokes equations [108], or taken into account through the jump conditions (Eqs. 3.1-3.3) by the geometrical components κ and \mathbf{n} , or the surface force \mathbf{f} . In the first approach, the surface tension contribution is modelled by a volume force depending on the volume fraction derivatives expressed over the fluid mesh [10]. Another approach relies on the writing of the jump conditions directly onto the interface approximation. This latter method turns out to be more accurate because it does not a-priori suffer from a spreading of the capillary force over the fluid mesh : calculations are carried out precisely at the surface location. The ghost fluid method [34] and the front-tracking approach [26] belong to these techniques. However, when the interface does not fit to the nodes where the conservation equations for velocity, temperature and pressure are solved, the local capillary information must be distributed on the surrounding fluid nodes, which produces a smoothing effect of the surface tension, again [34, 108].

The present work is focused on the numerical evaluation of the mean curvature κ , the unit normal vector \mathbf{n} and the surface tension \mathbf{f} , in the framework of a discrete interface made of a triangle tessellation. Coming either from the computational fluid dynamics domain, for example in the front-tracking method framework, or from the computer aided design, only few studies have dealt with their convergence properties and robustness [67]. Moreover, no comparison between a large panel of numerical methods exists in the literature. Lastly, the only available validations concern static surfaces where the nodes of the discrete surface lie exactly on the reference surface.

In our contribution, three large families of methods are studied to get the numerical approximations. In the framework of the computational fluid dynamics, we have developed a original time dependent analytical surface, that qualitatively gives rise to characteristic patterns met

in multiphase flows, namely the formation of ligaments or the birth of a drop/bubble on a flat surface/liquid film. These new test cases have allowed us, for the first time, to examine the effect of the advection scheme, with remeshing procedures, onto the accuracy of κ , \mathbf{n} and \mathbf{f} approximations.

The paper is organized as follows. The different numerical approximations of κ , \mathbf{n} and \mathbf{f} , which are stemmed from the three families of methods, are first briefly reminded (Sec. 3.2), and then compared against each other for a complex static analytical surface (Sec. 3.3). Section 3.4 is then devoted to comparisons for the time dependent surfaces, first for an exact advection but with a remeshing procedure, and then using the numerical transport scheme. Conclusions and perspectives are finally drawn in the last section.

3.2 Numerical methods for evaluating the curvature κ , the unit normal vector \mathbf{n} and the capillary force \mathbf{f}

The aim of this section is to define the numerical methods used in this paper to approximate the local curvature κ , the unit normal vector \mathbf{n} and the capillary force \mathbf{f} . These evaluations rely on a discrete representation of the interface which consists of a set of planar triangular elements, defined by their vertices, and the knowledge of the neighbours through the edges of each triangle. This kind of representation is widely used in the framework of front tracking methods.

Three main families of approximations are identified in the literature. They are based either on

- the discretization of the Laplace-Beltrami Operator,
- an Integral Formulation to get the surface tension over a specific area,
- a reconstruction method of the interface by an analytical surface.

The different methods devoted to the calculation of the interface properties, and which belong to the three families presented here above, are detailed in the following parts. But first, some notations are introduced.

3.2.1 Main mathematical notations

The discrete approximation of the interface is made up of a family \mathcal{T} of triangles. Let \mathcal{X} be the set of vertices of the whole triangles. The vertices of any $T \in \mathcal{T}$ are simply noted $\delta^2 T \subset \mathcal{X}$. So, we refer to

- the coordinate of any vertex $x \in \mathcal{X}$ by \mathbf{x} .
- the surface of any triangle $T \in \mathcal{T}$ by S_T .

We also introduce

- the set whose elements are couples of vertices $\mathcal{X}_2 = \{(x_\alpha, x_\beta) \in \mathcal{X}^2 \mid \exists T \in \mathcal{T}, \{x_\alpha, x_\beta\} \subset \delta^2 T\}$.
- the first and second neighbourhood of any vertex $x \in \mathcal{X}$ by $\mathcal{N}_1(x)$ and $\mathcal{N}_2(x)$, with

$$\mathcal{N}_1(x) = \{x' \in \mathcal{X} \mid (x, x') \in \mathcal{X}_2\} \quad (3.4)$$

$$\mathcal{N}_2(x) = \{x' \in \mathcal{X} \setminus \mathcal{N}_1(x) \mid \exists x'' \in \mathcal{N}_1(x), (x', x'') \in \mathcal{X}_2\} \cup \mathcal{N}_1(x) \quad (3.5)$$

To express the numerical approximations of the curvature, normal vector and capillary force, the endpoints of the triangle edges have to be ordered. This order is closely linked to the notion of the exterior normal vector, noted \mathbf{n} . For a closed surface, it is easily defined. As for an open one, a side of the surface is arbitrary chosen as facing "exterior", and \mathbf{n} is set pointing towards this region. Then, we define

- the orientation of any triangle $T \in \mathcal{T}$ by $\mathcal{X}_2(T) \subset \mathcal{X}$

$$\mathcal{X}_2(T) = \{(x_\alpha, x_\beta), (x_\beta, x_\gamma), (x_\gamma, x_\alpha) \mid \delta^2 T = \{x_\alpha, x_\beta, x_\gamma\}, ((\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) \times (\mathbf{x}_\gamma - \mathbf{x}_\alpha)) \cdot \mathbf{n} > 0\} \quad (3.6)$$

with \times the cross product.

- the unit normal vector to any triangle $T \in \mathcal{T}$ by \mathbf{n}_T . So, $\forall T \in \mathcal{T}$, with $\delta^2 T = \{x_\alpha, x_\beta, x_\gamma\}$ and $\mathcal{X}_2(T) = \{(x_\alpha, x_\beta), (x_\beta, x_\gamma), (x_\gamma, x_\alpha)\}$, then

$$\mathbf{n}_T = \frac{(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) \times (\mathbf{x}_\gamma - \mathbf{x}_\alpha)}{\|(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) \times (\mathbf{x}_\gamma - \mathbf{x}_\alpha)\|} \quad (3.7)$$

- an approximation of the unit normal vector to the surface at any vertex $x \in \mathcal{X}$ by $\mathbf{n}_{\mathcal{N}_1}(x)$:

$$\mathbf{n}_{\mathcal{N}_1}(x) = \frac{\sum_{T \in \mathcal{T} \mid x \in \delta^2 T} S_T \mathbf{n}_T}{\left\| \sum_{T \in \mathcal{T} \mid x \in \delta^2 T} S_T \mathbf{n}_T \right\|} \quad (3.8)$$

This expression is simply proportional to the linear weighted combination by the triangle surface S_T of the normal vectors \mathbf{n}_T of all the triangles T sharing the vertex $x \in \mathcal{X}$.

3.2.2 Discretization of the Laplace-Beltrami Operator (LBO-methods)

The Laplace-Beltrami Operator (LBO) is the generalization of Laplacian operator from Euclidean spaces to curved manifolds. Commonly used in the domain of computer aided design, it allows to get the geometrical properties of the surfaces, but also to smooth them. Different approximations of the LBO exist in the literature (see [23, 76, 91, 116] to cite but a few). In this paper, the retained method is based on that by MEYER et al. [76]. The approximation of the mean curvature normal vector \mathbf{K} is :

$$\mathbf{K}(x_i) = \frac{1}{2\mathcal{A}_{mixed}} \sum_{(T, T') \in \mathcal{T}_i^*} (\cot \alpha_{ij} + \cot \beta_{ij})(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) = 2\kappa_i \mathbf{n}_i \quad (3.9)$$

with $\mathcal{T}_i^* = \{T \in \mathcal{T}, T' \in \mathcal{T} \mid \delta^2 T = \{x_i, x_l, x_j\}, \delta^2 T' = \{x_i, x_j, x_k\}\}$ and $\alpha_{ij} = \widehat{x_i x_l x_j}$ and $\beta_{ij} = \widehat{x_j x_k x_i}$ (Fig. 3.1a), κ_i and \mathbf{n}_i are the approximations of the mean curvature and unit normal

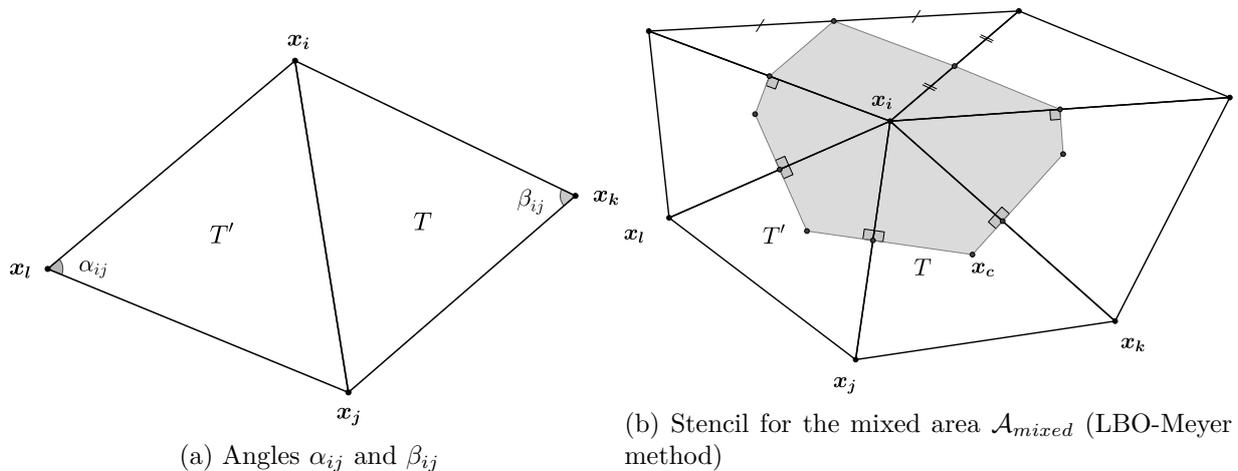


FIGURE 3.1 – Notations and stencil for the discrete LBO methods [31, 76]

vector to the surface at x_i , \mathcal{A}_{mixed} is the measure of the mixed area (Fig. 3.1b). The shape of the mixed area \mathcal{A}_{mixed} depends on the topology of the triangles sharing the vertex x_i .

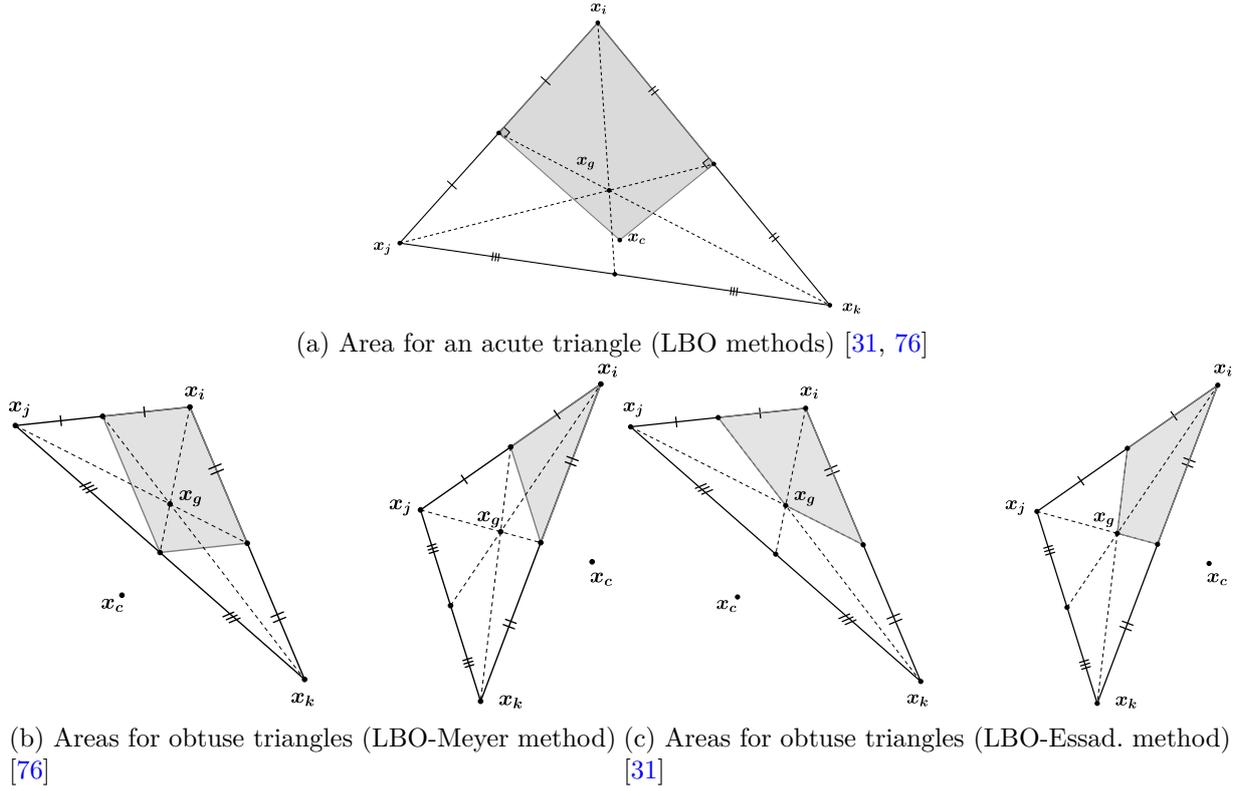


FIGURE 3.2 – Construction of the mixed area \mathcal{A}_{mixed} of the discrete LBO, according to MEYER et al. [76] and ESSADKI [31]

LBO-Meyer method [76] In the original method, when the angles of the element are acute, its contribution to \mathcal{A}_{mixed} is the Voronoi area (Fig. 3.2a).

It corresponds to the area of the quadrangular element surface defined by the vertex x_i , the middle of the two edges adjacent to x_i and the circumcenter x_c of the triangle. For obtuse triangles, the circumcenter is outside the triangle and two cases must be discriminated (Fig. 3.2b, left). If $\widehat{x_j x_i x_k} > \pi/2$, the circumcenter is replaced by the middle of the opposite edge. Otherwise, the area is that of the triangle defined by the vertex x_i and each middle of the two edges adjacent to x_i (Fig. 3.2b, right).

LBO-Essad. method [31] An alternative approach of the mixed area \mathcal{A}_{mixed} can be used. Whereas the formalism does not change for acute triangles (Fig. 3.2a), for an obtuse angle, the local contribution is based on the Voronoi area for which the circumcenter is replaced by the barycenter x_g (Fig. 3.2c).

The approximated surface tension, at vertex x_i , is simply expressed by $\mathbf{f}_i = \sigma \mathbf{K}(x_i)$ and the approximated local curvature and normal vector to surface S , at node x_i , write :

$$\mathbf{n}_i = \text{sign}(\mathbf{f}_i \cdot \mathbf{n}_{\mathcal{N}_1(x_i)}) \frac{\mathbf{f}_i}{\|\mathbf{f}_i\|} \quad , \quad \kappa_i = \frac{1}{2\sigma} \text{sign}(\mathbf{f}_i \cdot \mathbf{n}_{\mathcal{N}_1(x_i)}) \|\mathbf{f}_i\| \quad (3.10)$$

3.2.3 Integral Formulation of the surface tension (IF-methods)

In the Integral Formulation family, the approximation of an average surface tension is directly computed. Initially proposed in the front-tracking framework by POPINET et al. [94] for 2D cases, this method has been later on extended to 3D cases by TRYGGVASON et al. [122]. Assuming a constant surface tension σ , the average surface tension over S , $\bar{\mathbf{f}}$, is the circulation of the "pulls"

exerted along the border ∂S :

$$\bar{\mathbf{f}} = \frac{\sigma}{S} \int_S \kappa \mathbf{n} dS = \frac{\sigma}{S} \oint_{\partial S} \mathbf{t} \times \mathbf{n} dl \quad (3.11)$$

where \mathbf{t} is the unit tangent vector to ∂S and \mathbf{n} the unit normal vector to S .

IF-Trygg. method [123] There is an earlier version of this method proposed by [122] where a quadratic fitting is used to evaluate \mathbf{t} and \mathbf{n} in the integral formulation. However we choice the recent one as it is the most used. The discrete surface is centred around the vertex x_i and relies on a set of adjacent triangles (Fig. 3.3).

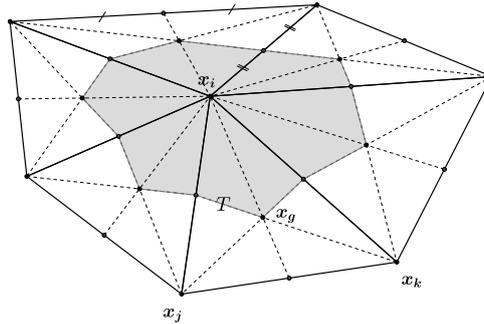


FIGURE 3.3 – Stencil for the original [123] method of the Integral Formulation (IF-Trygg. method)

The surface S is a collection of quadrangular polygons, defined piecewise on each triangle, whose one of the vertices are x_i , the middle of the two edges adjacent to x_i and the barycentre x_g of the triangle. After simplification, it is possible to remove the edge nodes and the barycentre, to get a relation based on the mesh vertices belonging to $\mathcal{N}_1(x)$:

$$\mathbf{f}_i = \frac{\sigma}{2S} \sum_{T \in \mathcal{T}_i^*} (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j) \times \mathbf{n}_T \quad (3.12)$$

with $\mathcal{T}_i^* = \{T \in \mathcal{T} | \delta^2 T = \{x_i, x_j, x_k\}, (x_j, x_k) \in \mathcal{X}_2(T)\}$, $S = \sum_{T \in \mathcal{T}_i^*} S_T$, and \mathbf{n}_T the unit normal vector to the triangle T .

IF-triang. method The main difference with the previous method dwells in the shape of the surface. In the triangular version of the Integral Formulation, S covers the whole triangles having x_i as a vertex (Fig. 3.4).

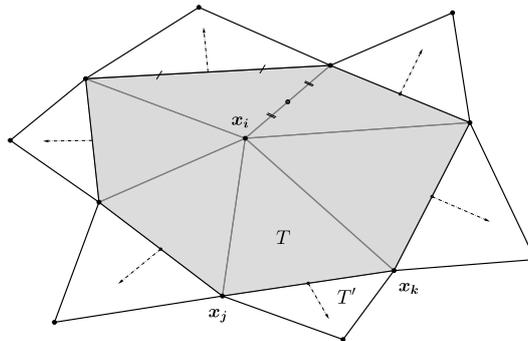


FIGURE 3.4 – Stencil for the ‘triangle version’ of the Integral Formulation (IF-triang. method)

The average surface tension is then expressed by

$$\mathbf{f}_i = \frac{\sigma}{S} \sum_{(T,T') \in \mathcal{T}_i^*} (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j) \times \frac{S_T \mathbf{n}_{T'} + S_{T'} \mathbf{n}_T}{\|S_T \mathbf{n}_{T'} + S_{T'} \mathbf{n}_T\|} \quad (3.13)$$

with $\mathcal{T}_i^* = \{T \in \mathcal{T}, T' \in \mathcal{T} | x_i \in \delta^2 T, x_i \notin \delta^2 T', \{x_j, x_k\} = \delta^2 T \cap \delta^2 T', (x_j, x_k) \in \mathcal{X}_2(T)\}$, S_T and $S_{T'}$ respectively the surfaces of the triangles T and T' , \mathbf{n}_T and $\mathbf{n}_{T'}$ their respective unit normal vectors and $S = \sum_{T \in \mathcal{T}_i^*} S_T$.

Once the surface tension is evaluated, the approximated local curvature and normal vector to the surface S at node x_i are expressed in the same way as for the LBO-methods (see Eq. (3.10)).

3.2.4 Surface Reconstruction (SR-methods)

Knowing the analytic equation of a surface enables the exact calculation of its geometrical properties, specifically the mean curvature and the unit normal vector [45]. This equation can be constructed over the entire surface, like what was proposed by POPINET et al. [94] and TRONTIN et al. [121] to approximate 1D interfaces with cubic splines, or defined locally to approximate a part of the interface mesh [26, 138]. The local approach leads obviously to simpler methods, especially for 2D surfaces and complex interface shapes. Whereas the curvature does not depend on the local coordinates, a transition matrix must be used to proceed to the change from the local to the global basis.

For the local reconstruction methods, the local basis originates at the vertex x_i where the interface properties have to be approximated. Several methods are distinguished in this paper depending on

- the expression of the approximate normal vector to the surface at x_i ,
- the stencil employed to reconstruct the local analytical surface,
- the eventual requirement that the node x_i belongs to the reconstructed surface.

Once the approximate normal vector is defined, the two other vectors of the orthogonal basis can be chosen arbitrarily. In this paper, the reconstructed analytical surface has a polynomial expression and the calculation of the coefficients is the result of a least square method. The parameters of the Surface Reconstruction method are now detailed.

Stencil for the reconstructed surface – $\mathcal{N}_1(x_i)$ or $\mathcal{N}_2(x_i)$.

The influence of the stencil on the reconstructed surface is studied. The least square method is defined on mesh vertices that belong to, either the first neighbourhood $\mathcal{N}_1(x_i)$, or the second neighbourhood $\mathcal{N}_2(x_i)$ of the vertex x_i . Furthermore, some precautions must be taken into account when using the first neighbourhood $\mathcal{N}_1(x_i)$. Indeed, if the number of vertices is not sufficient to use the least square method, a completion is made by choosing arbitrary vertices in the second neighbourhood [26]. The Appendix D.1 shows that when these additional vertices are aligned with the first neighbourhood, it deteriorates the evaluation of the curvature and normal vector based on the first neighbourhood. Therefore in this peculiar situation, the solution adopted in this work is to automatically switch to a reconstruction based on the second neighbourhood when needed.

Vertex x_i solution (or not) of the reconstructed surface – $a_{00} \neq 0$ or $a_{00} = 0$.

The local surface is approximated by the equation $Z = f(X, Y)$, with the polynomial function $f(X, Y)$ defined by :

$$f(X, Y) = a_{20}X^2 + a_{11}XY + a_{02}Y^2 + a_{10}X + a_{01}Y + a_{00} \quad (3.14)$$

where a_{ij} are unknown real coefficients to be determined, X, Y, Z are the local coordinates relative to the local basis. Depending on the method, the coefficient a_{00} will be set free or imposed to zero as proposed by DU et al. [26] et ZINCHENKO et al. [138]. In this latter case, the reconstructed surface passes exactly by vertex x_i .

Construction of the local basis ($\mathbf{e}_X, \mathbf{e}_Y, \mathbf{n}_\alpha$), with $\alpha \in \{c, m, iter\}$

The local basis is constructed first by defining the local tangent plane ($\mathbf{e}_X, \mathbf{e}_Y$), which is characterized by its normal vector. Different approaches exist to evaluate this normal vector.

- A first choice is a linear combination of all the unit normal vector \mathbf{n}_T to triangle T , whose vertices belong to the stencil $\mathcal{N}_1(x_i)$:

$$\mathbf{n}_c(x_i) = \frac{\sum_{T \in \mathcal{T}|x_i \in \delta^2 T} S_T \mathbf{n}_T}{\left\| \sum_{T \in \mathcal{T}|x_i \in \delta^2 T} S_T \mathbf{n}_T \right\|} \quad (3.15)$$

It can be noted that $\mathbf{n}_c(x_i) \equiv \mathbf{n}_{\mathcal{N}_1}(x_i)$ defined in Eq. (3.8).

- In the works by DU et al. [26], the authors utilize the formulation proposed by MAX [73] :

$$\mathbf{n}_m(x_i) = \frac{\sum_{T \in \mathcal{T}_i^*} \frac{(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) \times (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i)}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|^2 \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i\|^2}}{\left\| \sum_{T \in \mathcal{T}_i^*} \frac{(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) \times (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i)}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|^2 \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i\|^2} \right\|} \quad (3.16)$$

with $\mathcal{T}_i^* = \{T \in \mathcal{T} | \delta^2 T = \{x_i, x_j, x_k\}, (x_j, x_k) \in \mathcal{X}_2(T)\}$

- Another procedure, proposed in the paper by ZINCENKO et al. [138], is based on an iterative calculation of the unit normal vector $\mathbf{n}_{iter}(x_i)$ in order that this vector corresponds exactly to the unit normal vector of the reconstructed interface at x_i .

To distinguish the different approaches used in the Surface Reconstruction methods, from now on, they will be called SR- \mathcal{N}_k - $\mathbf{n}_{\alpha-\beta}$, with $k \in \{1, 2\}$ for the stencil size, $\alpha \in \{c, m, iter\}$ for the unit normal vector defining the local tangent plane and $\beta \in \{0, a_{00}\}$ to enforce or not x_i to belong to the reconstructed surface. It is worth to point out that the SR- \mathcal{N}_1 - n_m -0 and SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_{iter} -0 methods were respectively proposed by DU et al. [26] and ZINCENKO et al. [138].

The calculations of the curvature κ and unit normal vector \mathbf{n} are performed on the reconstructed analytic function $Z = f(X, Y)$. The surface tension at node x_i then reads :

$$\mathbf{f}_i = \sigma \kappa(x_i) \mathbf{n}(x_i) \quad (3.17)$$

Considering the formulae from differential geometry, the unit normal vector and the mean curvature write [45] :

$$\tilde{\mathbf{n}} = \frac{\nabla F}{\|\nabla F\|} \quad (3.18)$$

and

$$\tilde{\kappa} = -\nabla \cdot \tilde{\mathbf{n}} = \frac{\nabla F \cdot H(F) \cdot \nabla F^T - \|\nabla F\|^2 \text{Trace}(H(F))}{2\|\nabla F\|^3} \quad (3.19)$$

where $H(F)$ is the Hessian matrix of function $F(X, Y, Z) = Z - f(X, Y)$, with components $H_{\alpha\beta}(F) = \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha \partial \beta}$ and $(\alpha, \beta) \in \{X, Y, Z\}^2$.

3.2.5 Discrete surfaces and solution accuracy

The discrete surfaces are constructed into successive steps. First, a planar surface is covered by a set of equilateral triangles of edge size d . Let us note \tilde{x} any vertex of this mesh, with

coordinates $\tilde{\mathbf{x}} = (x, y, 0)$. Since the mesh of any interface, for example issued from a front tracking method, is often made up of more or less irregular triangles, a disturbed mesh is build from the regular one by using a mapping $\mathcal{P}(\tilde{x}) = \tilde{x}$ such that

$$\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{x}} + r \times p \times d \times (\cos 2\pi\theta, \sin 2\pi\theta, 0) \quad (3.20)$$

In this expression, (r, θ) is a couple of random variables drawn from a $[0, 1]$ -uniform distribution and p is a prescribed number driving the magnitude of perturbations ($0 \leq p \leq 0.2$). Moreover for steady problems (static case), the vertices are then projected on the known analytical surface $z = h(x, y)$ to define the discrete counterpart of the continuous surface. It is worth pointing out that, even if $p = 0$, the discrete mesh of the surface is not any more made up of equilateral triangles, since the projection has distorted the shape of all the elements. For dynamics problems, the vertices are simply advected in time by the velocity field. When $p \neq 0$, the error on the curvature and normal vector are evaluated on 10 random draws (r, θ) , both for the static and dynamic cases ; the retained value is simply the average.

In order to quantify the accuracy of the numerical methods with respect to the exact solutions, two measures of the error are used. Let ϕ be either the scalar variable κ , the unit normal vector \mathbf{n} or the surface tension \mathbf{f} . We denote by $\phi(x_i)$ the exact value of ϕ at node x_i , and ϕ_i its numerical approximation. Then, two relative errors are defined over the N vertices of the mesh by :

$$\text{Err}_2^{\text{rel}}(\phi) = \left(\frac{\sum_{j=1}^N (\phi_j - \phi(x_j)) \cdot (\phi_j - \phi(x_j))}{\sum_{j=1}^N \phi(x_j) \cdot \phi(x_j)} \right)^{1/2} \quad (3.21)$$

$$\text{Err}_\infty^{\text{rel}}(\phi) = \left(\frac{\max_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket} (\phi_j - \phi(x_j)) \cdot (\phi_j - \phi(x_j))}{\max_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket} \phi(x_j) \cdot \phi(x_j)} \right)^{1/2} \quad (3.22)$$

where ‘ \cdot ’ denotes either the usual product or the scalar product if ϕ is a vector. Since the studied surfaces are open, the error calculations are performed only for triangles far enough from the boundaries. Notice that this condition depends on numerical methods because they may rely on different stencil.

The numerous methods presented in this paper are mainly compared through curves which present the relative errors (3.21) (3.22) as a function of the dimensionless initial mesh size defined as $d \times \max_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket} (\kappa(x_j))$, with $\kappa(x)$ the exact curvature at node x . This latter relation can be re-interpreted as a function of the mean curvature radius $1/\kappa(x_j)$: let us assume that $d \times \max_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket} (\kappa(x_j)) = 10^{-2}$, then the edges of the initial triangles are 100 times smaller than the minimum of mean radius of curvature, $\min_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket} (1/\kappa(x_j))$. To distinguish in the graphs the two norms (3.21) (3.22), the curves drawn using L_2 are continuous whereas those with L_∞ -norm are discontinuous.

For the sake of brevity, the error curves for the surface tension will not be presented since their behaviour are similar to that of the curvature (same order of convergence and error level).

3.3 Analysis of a stationary surface

In this section, the static surface proposed by [67] is studied (Fig. 3.5) :

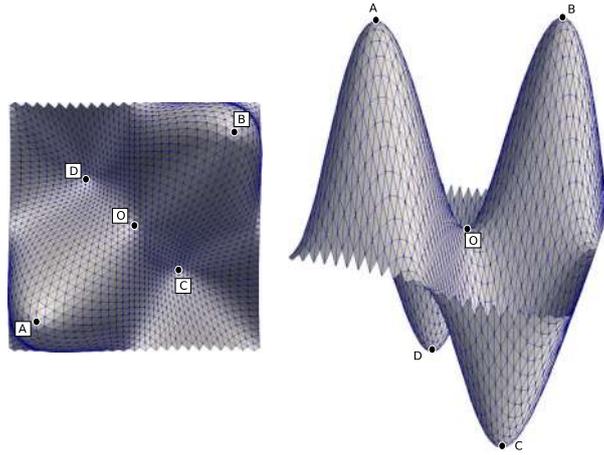


FIGURE 3.5 – Top (left) and side (right) views of the discrete mesh projected onto the surface (3.23).

$$h(x, y) = \sin(5x) \sin(5y) \quad \text{with} \quad (x, y) \in \left[-\frac{\pi}{5}, \frac{\pi}{5}\right] \times \left[-\frac{\pi}{5}, \frac{\pi}{5}\right] \quad (3.23)$$

The main interest of this analytical surface is that it is characterized by a large variety of curvatures, sum of the two principal curvatures. Points A , B , C and D have maximal curvatures and point O exhibits a zero mean curvature with maximal but opposite principal curvatures (saddle-node point). To avoid boundary effects, the initial flat surface is defined on a larger domain, $(x, y) \in [-2, 2] \times [-2, 2]$ and all the vertices in the sub-domain $(x, y) \in [-\pi/5, \pi/5]^2$ are taken into account for the error evaluation (3.21) (3.22).

3.3.1 Results

LBO-methods

The Laplace-Beltrami Operator discretization, LBO-Essad. [31] and LBO-Meyer [76] methods, are compared in this section as a function of the mesh size, and for a regular mesh ($p = 0$) and a disturbed one ($p = 0.2$).

Without perturbation ($p = 0$), the LBO-Meyer method provides clearly the best results for the curvature (Fig. 3.6a) : it is second order accurate in L_2 -norm and tends to be first order

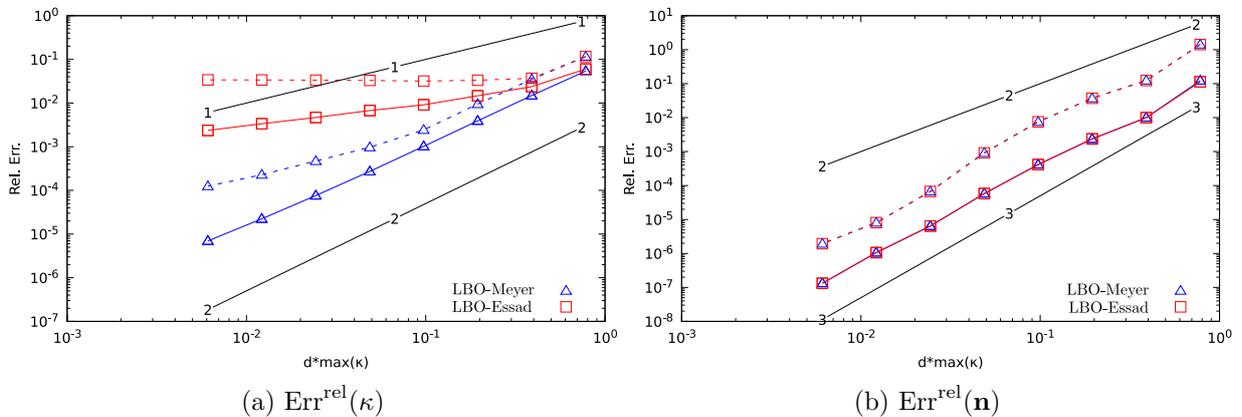


FIGURE 3.6 – LBO methods - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$

in L_∞ -norm. On the other hand for the LBO-Essad. method, the L_2 -order of convergence is much smaller than 1 and the L_∞ -norm saturates for $d \times \max_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket} (\kappa(x_j)) \leq 0.2$. This first comparison indicates that the discretization of the mixed area \mathcal{A}_{mixed} for evaluating the discrete Laplace-Beltrami Operator is of paramount importance when the triangles are obtuse. Whereas the curvature calculation is very sensitive to the chosen discrete method, the evaluation of the unit normal vector is not (Fig. 3.6b). The L_2 -order of convergence is nearly 3, like, in a lesser extend, the convergence rate in L_∞ -norm.

With disturbances of 20% the initial edge size d , the shape of the triangles wander strongly away from the equilateral structure. Figure 3.7a shows that both methods saturate at the same level with the grid refinement when the curvature is considered. Despite this lack of convergence,

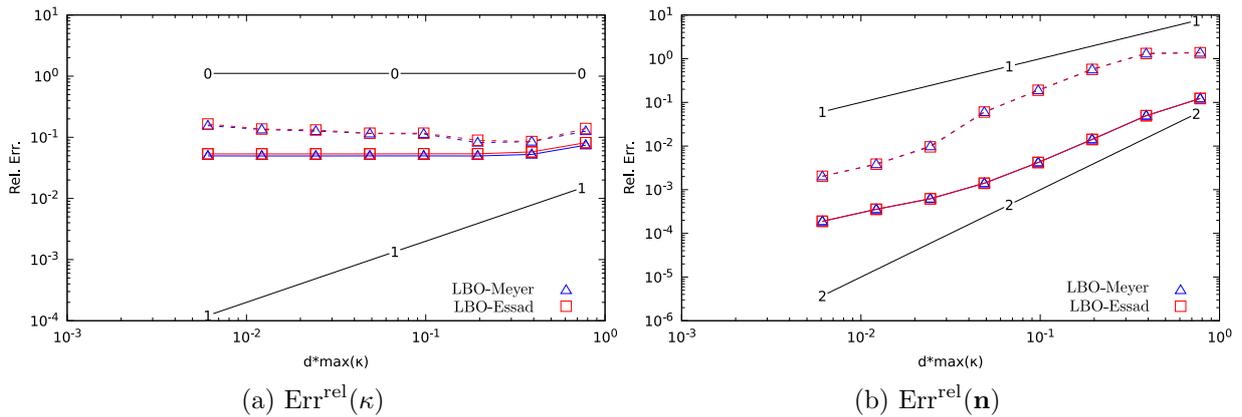


FIGURE 3.7 – LBO methods - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$

the unit normal vector continues to converge, for both methods, but at the first order instead of the third order measured for regular meshes.

IF-methods

For the Integral Formulation methods, namely the IF-Trygg. [123] and IF-triang. methods, the same analysis as the one proposed for the LBO-methods, is performed for a regular mesh ($p = 0$) and a disturbed one ($p = 0.2$).

For regular meshes ($p = 0$), the numerical curvatures converge with the decrease in the dimensionless grid size $d \times \max_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket} (\kappa(x_j))$ (Fig. (3.8a)). The accuracy of the IF-Trygg. method is second order for both norms. The results are worse for the IF-triang. method. Although the L_2 -order of convergence is equal to 2 for coarse grids, it decreases to 1.5 asymptotically. The behaviour of the L_∞ -norm, firstly second order, becomes first order for the fine meshes. Thus, for the finest grid the maximal relative error for the IF-triang. method is larger than 2 decades to that of the IF-Trygg. one. The numerical approximation of the normal unit vector is slightly better for the IF-Trygg. method than for the IF-triang. method (Fig. (3.8b)). However, they converge both with a second order accuracy for the L_2 and L_∞ -norms. This first set of tests seems to indicate that the IF-Trygg. method is more efficient than the IF-triang. method.

As for the LBO-methods, the curvature approximation is deeply worsen as soon as 20% disturbances are applied to the mesh (Fig. 3.9a). Again, the relative errors remains constant, whatever the grid size is. In that case, the IF-triang. method seems to be slightly better, about twice smaller than the IF-Trygg. method. The unit normal vector approximations keep convergent behaviours, with a first order slope, whatever the norm and the method (Fig. 3.9b). As for the

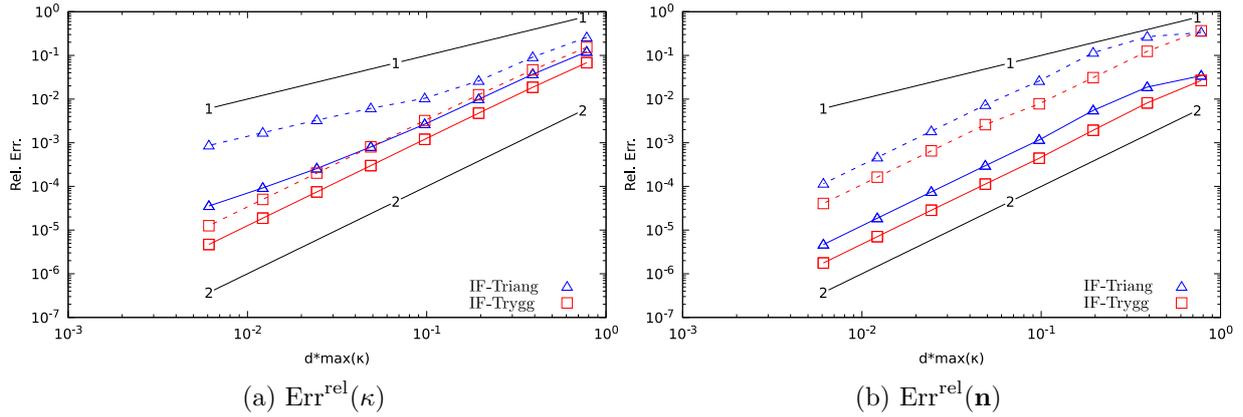


FIGURE 3.8 – Integral Formulation - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$

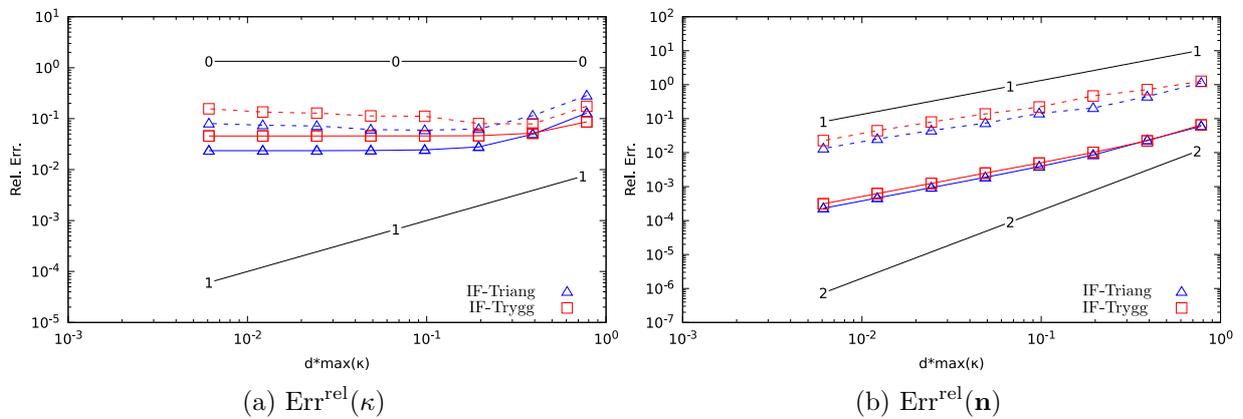


FIGURE 3.9 – Integral Formulation - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$

curvature, the IF-triang. method is better, but the difference is not really significant.

SR-methods

The last family of methods concerns the Surface Reconstruction techniques. Several approaches are compared in this section by using the notations presented in Sec. 3.2.4. Some are based on the first vertex neighbourhood, the $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_{\text{iter-}0}$ [138], $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$ [26], $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_c\text{-}0$, $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$ and $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_c\text{-}a_{00}$ methods, and others are expressed with the second neighbourhood, the $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$, $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_c\text{-}0$, $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$ and $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_c\text{-}a_{00}$ methods. Following the same methodology as before, the accuracy of the approximations for the curvature and the unit normal vector are carried out as a function of the grid size, in a first step for a regular mesh, and then for a 20% disturbed one.

Figure 3.10 illustrates the convergence of the curvature κ_i , for a regular grid ($p = 0$), of the different methods based on the first neighbourhood \mathcal{N}_1 (Fig. 3.10a) and second neighbourhood \mathcal{N}_2 (Fig. 3.10b). Whatever the norm, the methods are second order accurate. However, the best results are obtained with methods that enforce the vertex x_i to belong to the surface ($\text{SR-}\mathcal{N}_k\text{-}\mathbf{n}_\alpha\text{-}0$, with $k \in \{1, 2\}$, and $\alpha \in \{c, m, \text{iter}\}$). Likewise, the increase in the stencil from \mathcal{N}_1 to \mathcal{N}_2 for the reconstructed surface seems to cause a slight deterioration in the approximation. The same remarks apply when the relative errors on the normal vector are studied (Fig. 3.11).

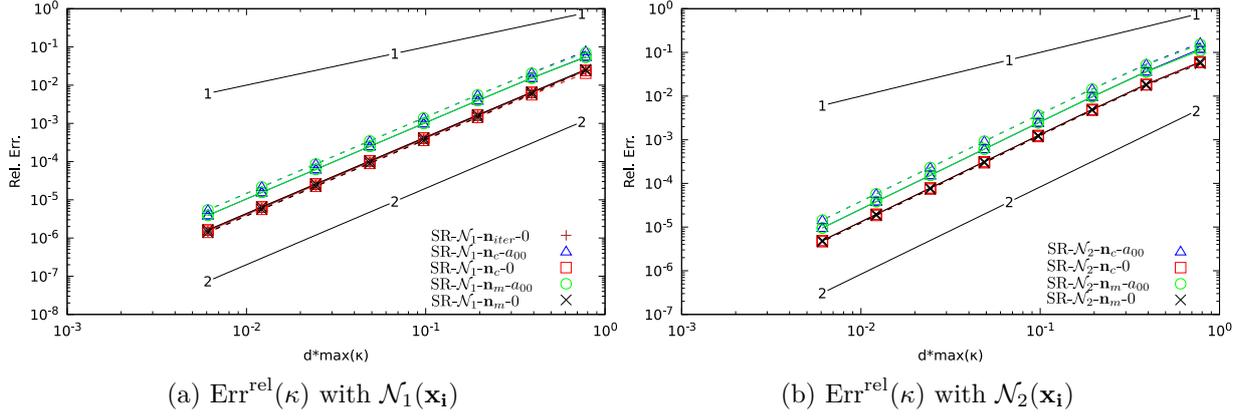


FIGURE 3.10 – Surface Reconstruction - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ , $p = 0\%$

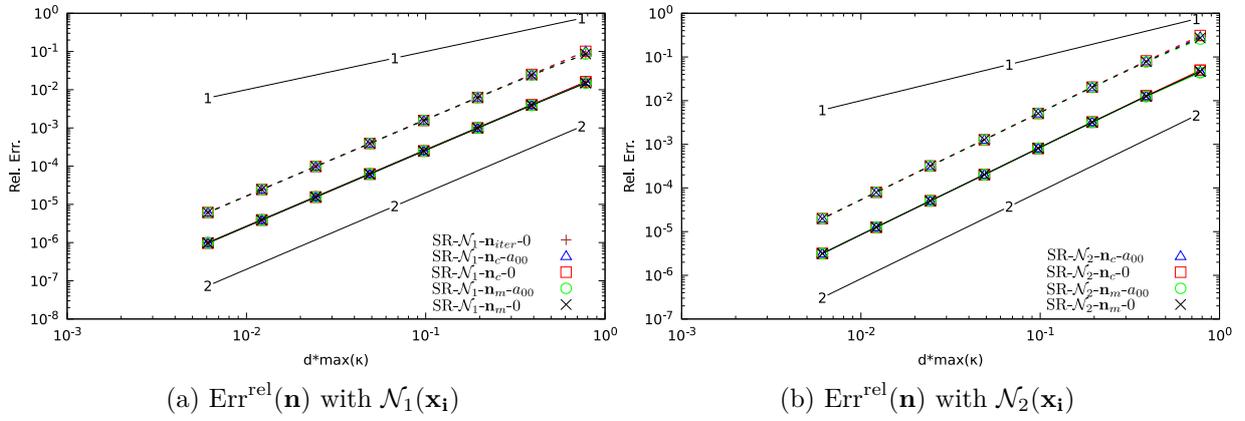


FIGURE 3.11 – Surface Reconstruction - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on \mathbf{n} , $p = 0\%$

When the triangular mesh is no longer regular ($p = 20\%$), the curvature convergence is maintained, but with a reduced convergence order equal to one (Fig. 3.12). Again, enforcing the

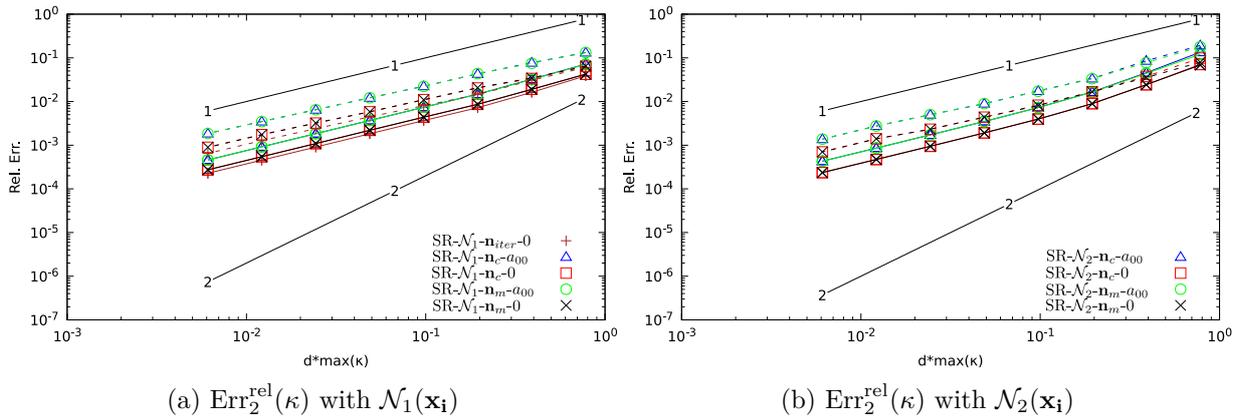


FIGURE 3.12 – Surface Reconstruction - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ , $p = 20\%$

vertex x_i to lay on the surface provides slightly better results. On the other hand, the relative errors on the normal vectors are not sensitive to the perturbation magnitude (Fig. 3.13). Indeed, both the error levels and convergence orders are preserved for disturbed meshes.

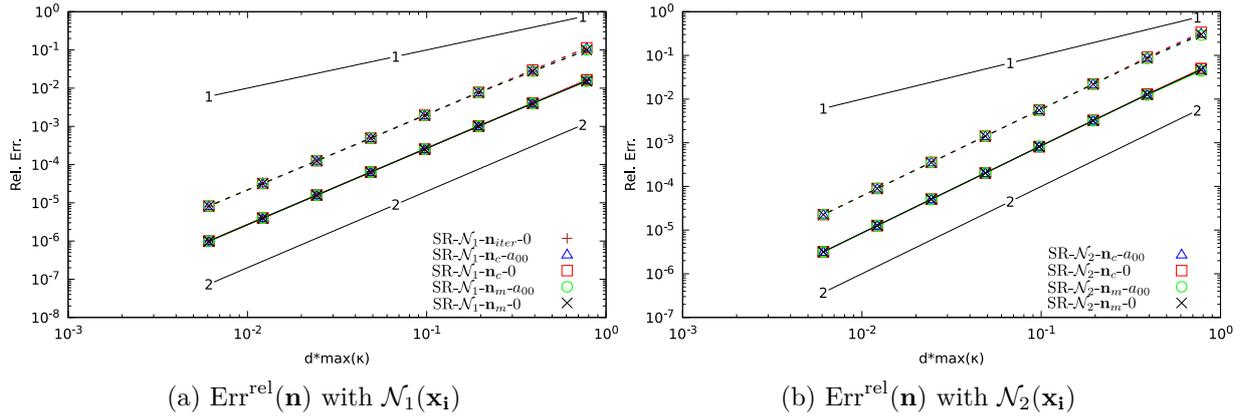


FIGURE 3.13 – Surface Reconstruction - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on \mathbf{n} , $p = 20\%$

3.3.2 Comparisons

In this section, the best methods of each family of discretization for the curvature and normal vector are now compared. This comparison step is performed for $p = 20\%$ which leads to the largest errors, but also for $p = 0\%$. Indeed, one may use (or imagine) smoothing procedures to recover a nearly regular mesh which would be close to what is obtained for $p = 0\%$. Thus, for the Laplace-Beltrami-Operator discretization, only the LBO-Meyer method [76] is considered. Concerning the discrete Integral Formulation, both the IF-Trygg. [123] and IF-Triang. are retained. For the last family of methods, the best ones are those satisfying that the vertex x_i , where the curvature and normal vector are calculated, belongs to the reconstructed surface. Thus, both the $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$ [26] and $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$ methods are kept, depending on the size of the neighbourhood for the calculation of the approximate surface.

Errors on curvature and normal vector

For the curvature calculation on a regular grid, although all the approaches exhibit convergence behaviours, the $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$ method provides the best results up to nearly two order smaller than those obtained with IF-Triang. when the L_2 norm is considered. This gap is increased up to three decades when the L_∞ norm is chosen (Fig. 3.14a).

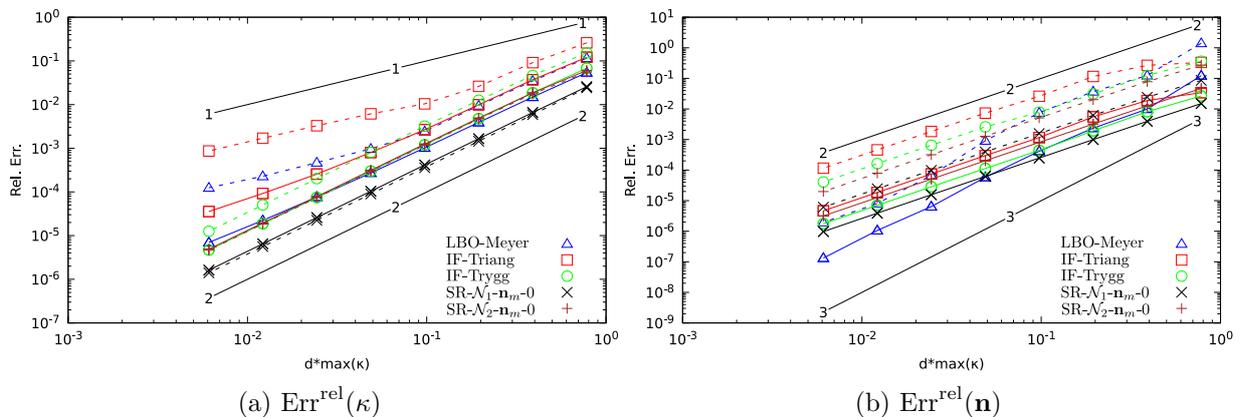


FIGURE 3.14 – Synthesis - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$

The differences between the methods are much smaller when the analysis is focused on the unit normal vector (Fig. 3.14b). The most interesting result is probably the third order conver-

gence of the LBO-Meyer method, which provides, on the one hand a quite bad approximation for coarse meshes and on the other hand best results for the finest meshes.

For the curvature calculation with 20%-magnitude perturbations, only the reconstruction methods $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$ and $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$ keep going to converge with the mesh refinement, but with a rate falling from second to first order for both norms (Fig. 3.15a); the other methods saturate. It is worth noticing that, even for small random perturbations, the quality of the cur-

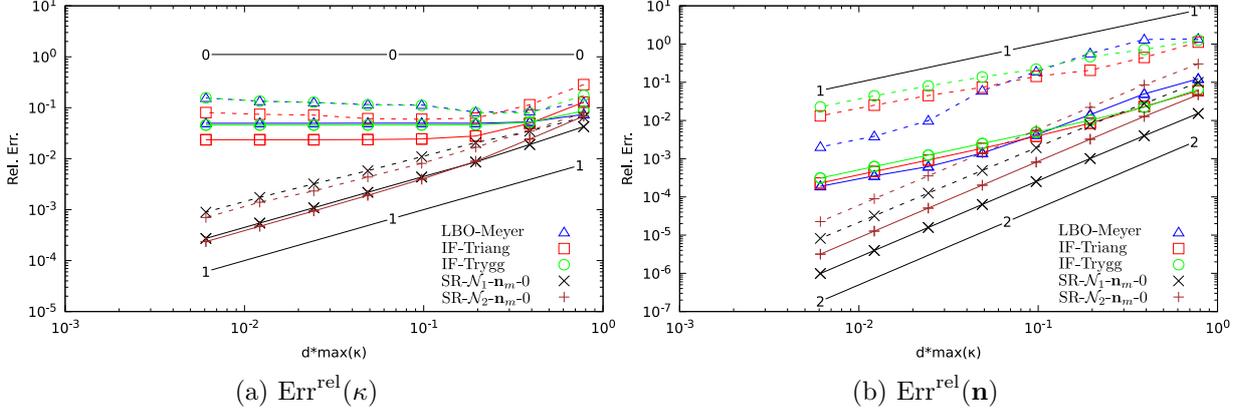


FIGURE 3.15 – Synthesis - Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$

vature approximations is highly deteriorated (Fig. 3.16). Indeed, for a given dimensionless mesh

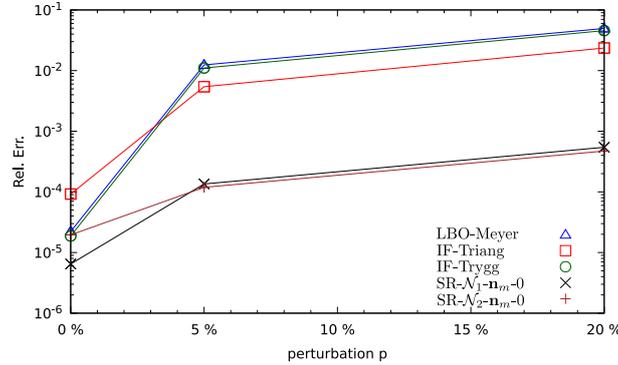


FIGURE 3.16 – Variation of the relative errors as a function of the maximum amplitude p of the perturbations

size $d \times \max(\kappa) = 1.22 \times 10^{-2}$, adding tiny random disturbances of maximal magnitude $p = 5\%$ increases the error induced by Reconstruction Surface methods by at most one decade, nearly two decades for the IF-triang. method and three decades for LBO-Meyer and IF-Trygg. methods. The use of irregular meshes for the normal evaluation reduces the order of convergence to one, except for the Surface Reconstruction methods which are quite insensitive to the perturbations (Fig. 3.15b).

A partial conclusion on the accuracy of the different numerical approximations can now be drawn. Contrary to the LBO and Integral Formulation methods, the Surface Reconstruction seems promising for the curvature calculation since it preserves convergence properties, even for disturbed meshes. Indeed, such meshes are very common : they can for example be met in front tracking methods for which the interface between two immiscible fluids are discretized by a set of triangles whose vertices are advected by the flow field. Although the accuracy of the normal

vector approximation is better for the Surface Reconstruction methods, the LBO and Integral Formulation remains attractive, despite much larger errors, especially with the L_∞ -norm.

CPU-cost and efficiency

Although the Surface Reconstruction methods provide very often the best approximations, their computational times are 3 times larger than that stemming from the LBO-Meyer approximation, and up to 10 times larger when compared to the IF-Trygg. method for the finest meshes. Thus, to perform pertinent comparisons, the accuracy of the different numerical methods must be studied in regards of the CPU time required to get them. The machine used is an Intel(R) Xeon (R) CPU E7-8890 v4 @ 2,20Ghz.

Whereas the Laplace Beltrami Operator and Integral Formulation methods compute the surface tension, from which the curvature and the unit normal vector are directly deduced, the Surface Reconstruction method needs at first the evaluation of an analytical approximation of the discrete surface, then the independent calculation of the curvature and the normal vector to finally evaluate the surface tension. The expensive part of these algorithms lies in the surface tension calculation for the LBO and IF methods, and in the Surface Reconstruction for the SR method. Therefore, the computation times for the evaluations of the curvature, the unit normal vector, the surface tension or the three together are similar.

Figures 3.17 illustrates the relative errors committed on the curvature approximations as a function of the CPU time spent to evaluate κ_i , \mathbf{n}_i and \mathbf{f}_i over the whole vertices of the mesh. It must be noticed that the increase in the CPU time corresponds obviously to the decrease in the mesh size. For $p = 0\%$, the most efficient methods are IF-Trygg. and $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$ (Fig. 3.17a). Assuming a relative error of 1%, the aforementioned methods take about 0.02 s and require a

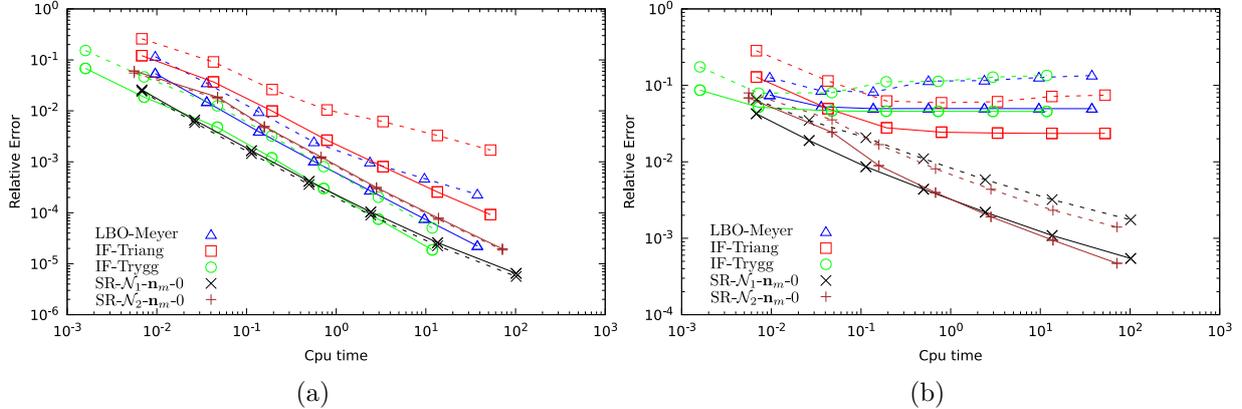


FIGURE 3.17 – Relative errors on κ in function of the time in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms, with (a) $p = 0\%$ and (b) $p = 20\%$.

mesh size $d \times \max_i(\kappa(x_i)) = 0.3$ for IF-Trygg and 0.5 for $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m$. But for $p = 20\%$, this accuracy can only be reached by the Surface Reconstruction methods, for a CPU time about 5 times larger than with $p = 0\%$ and a grid size $d \times \max_i(\kappa(x_i)) = 0.2$ (Fig. 3.17b).

3.3.3 Summary

For stationary surfaces, the evaluation of the curvature, which behaves as the surface tension, is the most sensitive step. Only the Surface Reconstruction methods prove to be convergent and accurate with the mesh refinement, whatever the regularity the surface mesh and the applied norm. The Laplace-Beltrami Operator and Integral Formulation methods are not robust

regarding the mesh regularity. And even for regular grids where they provide good results, their efficiencies are never better than the Surface Reconstruction methods.

These tests for static surfaces give us a first glimpse of the accuracy and robustness of the different approaches to get the surface properties. The next section is focused on the coupling between the surface advection and the computation of the curvature and normal vector.

3.4 Analysis of advected surfaces

In the previous section, the calculation of the curvature and normal vector estimates are carried out for a fixed discrete surface : the resulting errors are then only governed by the mesh size, the regularity of the triangles and the accuracy of the approximation methods. Such an approach has already been used in literature [67, 128, 132]. The only drawback of this static approach is that it does not take into account all the processes involved in the simulation of moving or deforming interfaces.

The aim of this part is to study, in what extend the advection of the interface mesh with all associated numerical procedures (advection, reseeding, swapping) may alter the results, both in the convergence process and in the accuracy.

3.4.1 Problem presentation

To address this problem, an analytical flow field acting on a moving interface, with deformations, is proposed in the first part of this section. Thereafter, the mechanisms used to advect and manage the interface mesh deformation are presented. These supplementary processes must also be taken into account for the definition of the reference value, which forms the third part. Later on, the methodology of the numerical tests is presented.

Velocity field

In order to design a dynamic interface with deformation, a divergence-free flow field defined in spherical coordinate frame is first considered

$$\mathbf{v} = \frac{Q}{r^2} \mathbf{e}_r, \quad r > 0 \quad (3.24)$$

with $4\pi Q$ the algebraic volume flow rate through the sphere of radius r . Starting from a discrete surface located at $z = z_0$, each vertex x_i , initially at coordinates $\mathbf{x}_i(t = 0) = (r(t = 0), \theta, \varphi)$, is advected in the radial direction according to equation :

$$r(t) = \sqrt[3]{3Qt + \frac{z_0^3}{\cos^3 \theta}} \quad (3.25)$$

Depending on the sign of parameter Q , the origin of coordinates corresponds to a sink or a source. If $Q < 0$, the surface is stretched to the singularity, forming an elongated ligament characterized by two principal curvatures with opposite signs. On the contrary, for $Q > 0$, the surface inflates, producing an increasing bubble with a sharp lateral edge, similar to an impact on a liquid film. The interface topology in this configuration also looks like a droplet impinging a flat liquid film. These two cases are treated in separated subsections, as they clearly define quite different interface deformation dynamics, with curvature singularities of liquid finger type for the case $Q < 0$ whereas the other case provides an abrupt curvature evolution of liquid impact type in the most varying interface geometry zones.

Surface advection

The mesh of the initial surface is made up of equilateral triangles with an edge size d . The vertices of these elements are then randomly displaced with a maximal disturbance p , according to relation (3.20). Advection from $t = n\Delta t$ to $(n+1)\Delta t$ of each vertex x_i of the mesh is the result of the numerical integration of equation $d\mathbf{x}_i/dt = \mathbf{V}_i$ by a second order Runge-Kutta scheme (Heun's method). The vertex velocity \mathbf{V}_i is spatially interpolated by the PERM method [74] which relies on the knowledge of the exact velocity components (Eq. 3.24) on the staggered Eulerian grids. The fix Eulerian grid size is always twice the edge length d of the equilateral triangles, before applying any perturbation. The time step Δt is based on the Courant number equal to 0.5. Using the maximal instantaneous velocity magnitude over all the vertices x_i , namely $\max_i(Q/r_i^2) = Q(3Qt + z_0^3)^{-2/3}$, and the Eulerian grid size $2d$, the instantaneous time step writes $\Delta t = (3Qt + z_0^3)^{2/3} \times d/Q$.

During the transport, the edges of the triangles are stretched or compressed, leading eventually to undesirable elements. To overcome this issue and in order to keep triangle edges in the range $[d/2, 2d]$, several procedures are implemented [99]. A new vertex may be inserted at the middle of a triangle edge, if its size exceeds $2d$. Conversely, if the triangle edge is less than $d/2$, it is suppressed by merging its two vertices at the center of the former edge. At last, to improve the quality of the triangles, edges may be flipped between two flatten triangles sharing their longest edge. All these procedures, which aim to keep a good approximation of the real interface, are performed at each time step (see Chap. 2 for more details). Concerning the transport of the interface mesh, both the exact advection (the edge velocity is not interpolated but uses the analytical flow field Eq. 3.25) and the discrete advection scheme described before, as in real multiphase flow simulations, are performed. Indeed, considering an exact advection is interesting here in order to separate several numerical effects linked to interface management, advection or geometrical properties.

The error calculations for the moving surface are restricted to $\theta \leq \theta_0$, with $\theta_0 = \arctan(L_0/z_0)$, $L_0 = 1$, $z_0 = 1$ for $Q < 0$ and $z_0 = 0.01$ for $Q > 0$. The extension of the initial flat surface is large enough to avoid edge effects during curvature and normal vector computations.

Reference surface

In Sec. 3.3, the mesh vertices were exactly located on the stationary surface. For advected surfaces, the time integration, as well as the different procedure developed to improve the mesh quality, do not ensure that the vertices belong to the analytical surface any more after exact or discrete advection. Therefore, to perform comparisons and error measurements (3.21) (3.22), a reference surface must be defined; this issue is addressed below.

Two different cases are met, depending on the exact or approximative nature of the vertex transport.

For an exact transport, the advected vertices are located on the analytical surface (3.25). Due to the mesh improvement procedures, the modified or new nodes are projected on the reference surface in order that all the vertices keep an exact position as a function of time. Therefore, reference values are simply calculated with relations (3.18) and (3.19).

On the other hand, the advection of the vertices by a numerical scheme (Sec. 3.4.1) does not allow to stay on the analytical surface at any time. To compare the curvature and the normal vector to reference solutions, each vertex $x_i(t^{(n)})$ of the mesh must be associated to a point $x_i^{\text{ref}}(n\Delta t)$ located on the analytical surface $S^{\text{ref}}(n\Delta t)$. This point, defined as the intersection between this surface and the streamline stemming from the considered vertex $x_i(t^{(n)})$, is obtained as follows (Fig. 3.18). The vertex $x_i(t^{(n)})$ is first advected with the exact transport equation

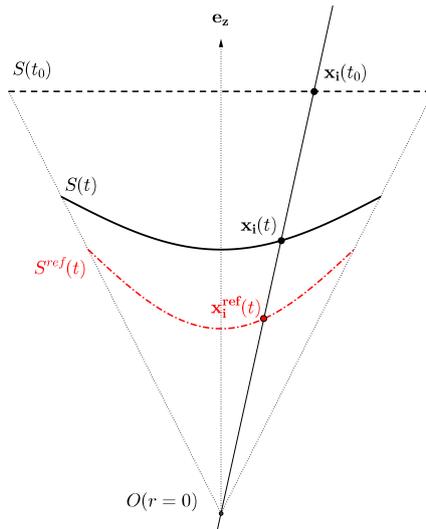


FIGURE 3.18 – Choice of the reference value to compute the relative errors.

backward in time to give a point $x_i^{\text{ref}}(0)$ belonging to the initial flat surface at $z = z_0$. Since the exact and approximative trajectories differ, the coordinates $\mathbf{x}_i^{\text{ref}}(0)$ and $\mathbf{x}_i(t^{(0)})$ (assuming the node x_i existed at $t = 0$ in the mesh) are different from each other. Therefore, the time required to move the vertex x_i from $\mathbf{x}_i(t^{(n)})$ to $\mathbf{x}_i^{\text{ref}}(0)$, is not $n\Delta t$. The reference point $x_i^{\text{ref}}(n\Delta t)$ is then simply obtained by advecting forward the point $x_i^{\text{ref}}(0)$ with the exact transport equation over the time interval $n\Delta t$. Finally, the reference curvature and the normal vector are computed at coordinates $\mathbf{x}_i^{\text{ref}}(n\Delta t)$ with relations (3.18) and (3.19) applied to the analytical surface $S^{\text{ref}}(n\Delta t)$.

Methodology of the numerical tests

Following the same methodology as in the previous section, the LBO-Meyer [76], IF-Trygg. [123], IF-Triang., and the SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 [26] methods are considered. In addition, variants of the Surface Reconstruction method are studied for larger stencils (\mathcal{N}_2 instead of \mathcal{N}_1) or by keeping the degree of freedom a_{00} in the evaluation of the approximated surface $Z = f(X, Y)$ (Eq. 3.14). For all these methods, the tracking of the interface as a function of time is carried out for an initial mesh made up of, either perfect equilateral triangles, or irregular patterns (see. Eq. 3.20).

To point out the role played by the advection scheme on the curvature and normal vector evaluation, simulations are carried out into two steps.

First, the displacement of the vertices is performed in an exact way in order to get rid of errors associated to the transport scheme. Thus, the difference between the numerical and exact solutions can only be due to the mesh structure, namely the spatial distribution of the triangles and their departure from the ideal equilateral shape. Contrary to the stationary surfaces, whose vertices always belong to six triangles, the addition or suppression of vertices/triangles during the advection process modify the number of neighbours.

In a second step, the transport scheme is accounted for, in order to estimate how much it reduces the accuracy of the numerical approximations for the curvature and normal vector.

3.4.2 Ligament formation – Case $Q < 0$

For a sink located at the origin $O(r = 0)$, the parameter Q is negative. The front tracking surface, initially at $z = z_0$, is sucked all the more that the vertices are close to the singularity. The resulting surface exhibits a thin tail coming closer and closer to O as time runs out. It is interesting to notice that, as can be observed in a two-phase flow, the evolution of the surface

looks like a long liquid ligament which becomes thinner and thinner as a function of time. In real two-phase flow, the surface tension instabilities would potentially break up the structure to produce droplets.

In the next subsections, the initial flat surface is located at $z_0 = 1$ and the volume flow rate is set to $4\pi Q = -0.4\pi/3$. The calculations are carried out until time $t = 9 s$. Figure 3.19 illustrates the shape of the surface at the final instant, for vertices advected in an exact way.

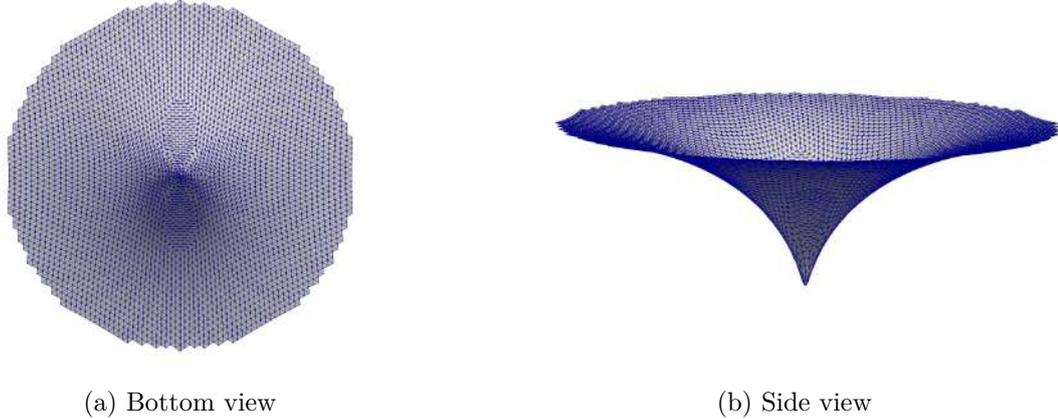


FIGURE 3.19 – Bottom and side views of the discrete mesh transported in a spherical velocity field, $Q < 0$

Exact transport – Ideal case

In the ideal case, vertices added by the remeshing process are projected back on the analytical surface and simulations are carried out with the exact transport model, starting from the surface at $z = z_0$ discretized by equilateral triangles (see Eq. 3.25).

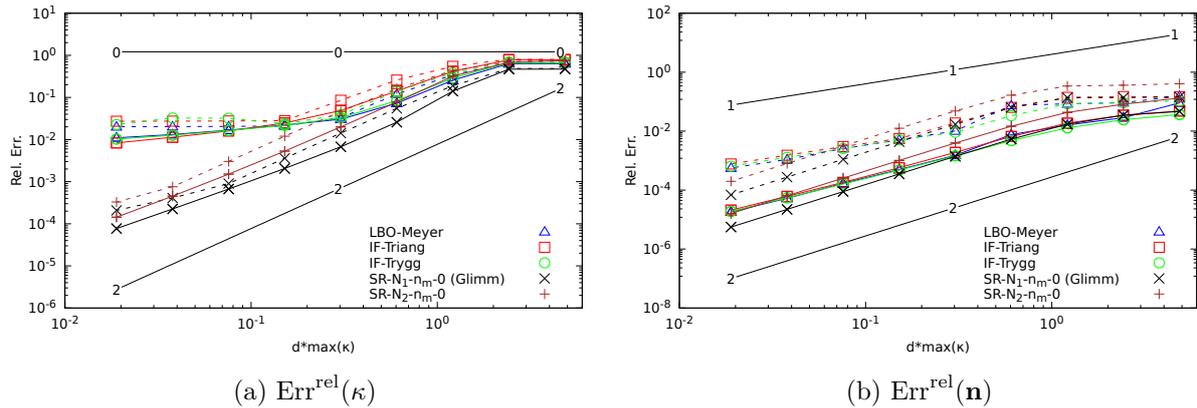


FIGURE 3.20 – Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms for κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$ with exact transport - $Q < 0$

The behaviors of the curvature error as a function of the reduced mesh size (Fig. 3.20) show convergences in L_2 -norm, but with very different orders depending whether IF or LBO methods are used (0.3, 0.34, 0.47 respectively for LBO-Meyer, IF-Trygg. and IF-Triang.) or the SR approximations are considered (nearly second order). This distinction is also true for the L_∞ -norm : whereas the asymptotic convergence is close to 2 for the SR-methods, a saturation is observed for the two other classes of methods. Concerning the normal vector, all the methods

are convergent with a second order slope in L_2 -norm, order that is preserved in L_∞ -norm with the SR methods and reduced to first order for the IF and LBO-methods.

Introducing 20%-perturbations in the initial mesh destroys the convergence of the curvature (Fig. C.1 in C.1) for the LBO and IF approximations in L_2 -norm, and even exhibits a divergence behavior in L_∞ -norm. This deterioration of accuracy is also measured for the SR solutions where the order of convergence falls from 2 to 1, whatever the norm considered. The normal vector approximations are also getting worst for the LBO and IF methods, decreasing from 2 to 1, whereas their orders are unchanged for the SR approximations.

Numerical scheme for the advection

Unlike the ideal case, the new vertices from the remeshing process are not projected back on the analytical surface and the advection is a second order Runge-Kutta scheme (Heun's method). The vertex velocity is interpolated by the PERM method [74].

Figure 3.21 gives the relative errors for the curvature and the normal vector, when the initial flat surface is made of equilateral triangles and an advection of the vertices is carried out by the numerical scheme. For the curvature evaluation, the substitution of the exact transport

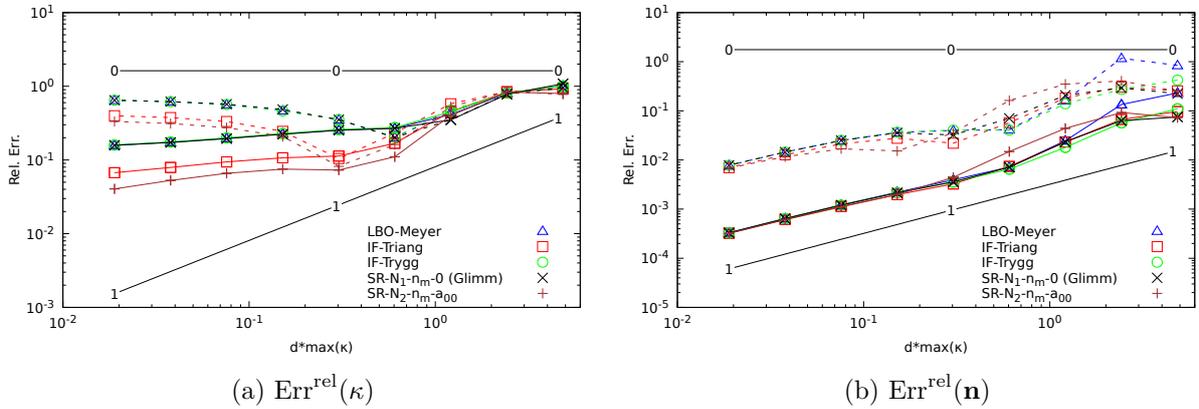


FIGURE 3.21 – Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms for κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$ with Lagrangian transport - $Q < 0$

by a numerical scheme increases the level of the errors for all methods (Figs. 3.20a and 3.21a). Moreover, the SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 [26] approximation loses precision to become as accurate as the LBO-Meyer [76] solution, which is much cheaper in computation time than SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0. To recover more accurate solutions, the number of neighbouring triangles utilized to define the reconstructed surface is increased from \mathcal{N}_1 to \mathcal{N}_2 , and the degree of freedom a_{00} of the analytical surface $Z = f(X, Y)$ (Eq. 3.14) is let free in the fitting process. These changes lead to the SR- \mathcal{N}_2 - \mathbf{n}_m - a_{00} method. The use of the numerical scheme for the vertex advection also deteriorates the order of convergence. As discussed here-above, the improvement in the quality of the approximations is the result of the increase in the stencil size with, for the Surface Reconstruction methods, the addition of one degree of freedom to compute the surface fitting. These two conditions ensure a smoothing effect of the surface irregularities, which originates from local remeshing performed to preserve a good mesh quality (see Sec. 3.4.1 for details).

For the normal vector calculation, the level of the errors is higher than the one obtained with the exact transport and the order of convergence is 1 (Figs. 3.20b and 3.21b).

A quick insight on results initialized with the flat surface made of equilateral triangles, whose vertices are randomly perturbed with maximum magnitude equal to a 20% edge length (see Fig. C.2 in C.1), shows that no significant difference appears between solutions obtained with $p = 0\%$ and $p = 20\%$. Thus, contrary to the exact advection case where the orders of

convergence were substantially reduced with the loss of mesh regularity, this is not observed here because the transport scheme introduces errors that dominate those produced by the lack of mesh regularity.

CPU-cost and efficiency

The choice of a numerical method results from an equilibrium between the accuracy it provides and the computation time required to get the solution. Figure 3.22 shows the relative

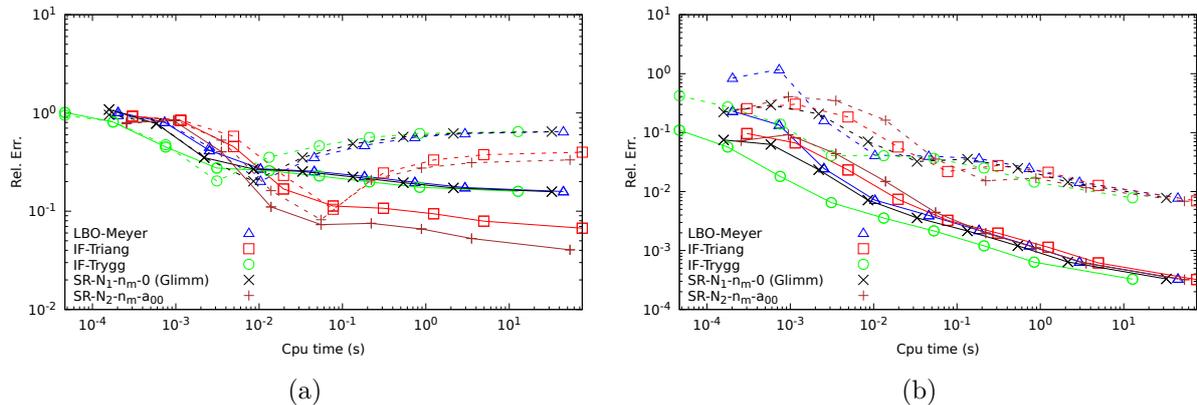


FIGURE 3.22 – Relative errors on κ (a) and \mathbf{n} (b) according to CPU time in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms, $p = 0\%$ - $Q < 0$ and numerical transport.

errors for the curvature and normal vector as a function of the CPU-cost, for an initial flat surface made up of undisturbed ($p = 0\%$) triangles advected by the numerical scheme. It has to be noticed that, for a given method and mesh, the computation time is identical between the curvature and the normal vector because both approximations are highly linked together (see eq. 3.10 for LBO- and IF-methods, and Eqs. 3.18 and 3.19 for the SR-methods).

For the curvature evaluation, the $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$ and IF-Triang. methods are the most CPU-time efficient as soon as the relative error in L2-norm is less than 20%. In that case, the aforementioned methods are 2, even 3 times more accurate for the same CPU cost. Their superiority is less clear when the normal vector has to be approximated (Fig. 3.22b). Indeed, unlike for the curvature, no method is really distinguishable from the others, except maybe the IF-Trygg. method [123] which goes a little bit faster, mainly when a coarse approximation is required. The computation times for disturbed initial meshes with $p = 20\%$ provide similar conclusions (C.1, Fig. C.3).

3.4.3 Bubble shape – Case $Q > 0$

When the flow emerges from the singularity $O(r = 0)$, the initial surface at $z = z_0$ is inflated in the radial direction, giving rise to a hemispherical shape connected on its boundary to a nearly flat surface. Like for $Q < 0$, this peculiar shape may be related to interfaces observed in two-phase fluid flows like droplet impinging onto a liquid film on a wall. A last interpretation could be the rising of a gas bubble which emerges through a gas/liquid interface. However, this case may be more critical than for $Q < 0$ because the region of rapid variation of curvature is much wider.

In this part, the initial surface is located at $z_0 = 0.01$ and the volume flow rate is equal to $4\pi Q = +0.4\pi/3$. Again, the surface advection is carried out until time $t = 9$ s. Figure 3.23 illustrates the shape of the surface at the final instant, for vertices advected in an exact way.

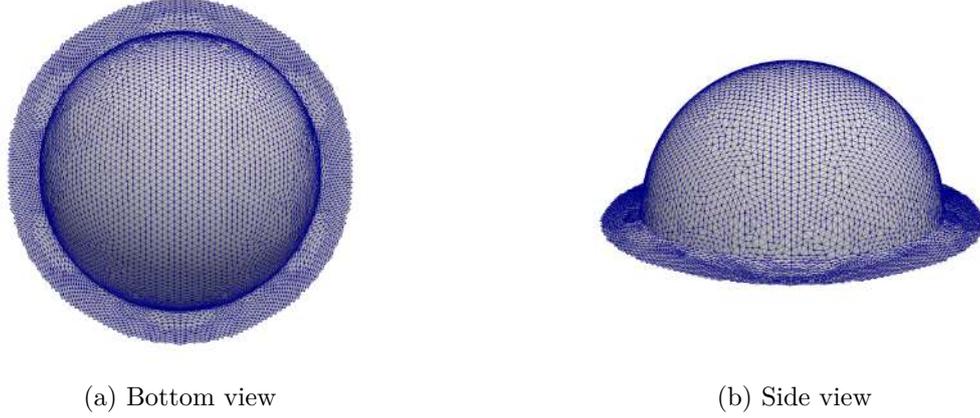


FIGURE 3.23 – Top and side views of the discrete mesh transported in a spherical velocity field, $Q > 0$

Exact transport – Ideal case

Like in Sec. 3.4.2 for $Q < 0$, the exact advection of the initial surface meshed by equilateral triangles is first studied, where the additional nodes, stemming from the refinement step, are projected on the analytical surface to ensure that all vertices lie on this surface.

Figure 3.24a exhibits that the errors on the curvature evaluation, calculated with the Laplace-

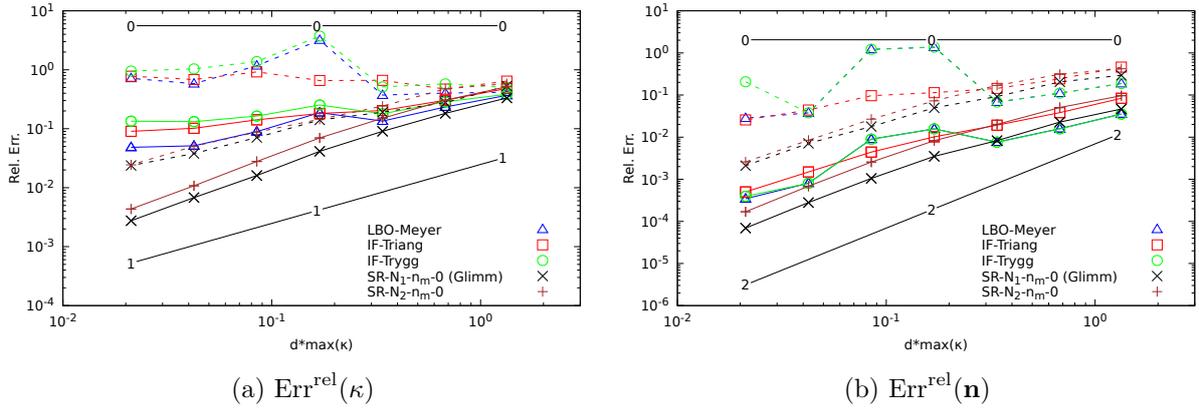


FIGURE 3.24 – Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$ with exact transport - $Q > 0$

Beltrami Operator and Integral Formulations methods, stagnate when the mesh size decreases. The Surface Reconstruction methods $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$ and $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$ converge with a slope slightly better than 1.

Applying 20%-perturbations to the initial mesh does not change the behaviors of the errors with the mesh refinement : the levels of the errors are only slightly increased for the curvature and the normal vector approximations (Fig. C.4 in C.1).

Numerical scheme for the advection

As a reminder, the advection is performed with a second order Runge-Kutta scheme (Heun's method) and the vertex velocity is interpolated by the PERM method of [74].

The accounting of the advection scheme for the initial surface meshed by equilateral triangles increases unsurprisingly the error levels, especially for the curvature variable (Fig. 3.25a versus Fig. 3.24a). On the finest mesh, the saturation of the LBO- and IF-methods is found again in

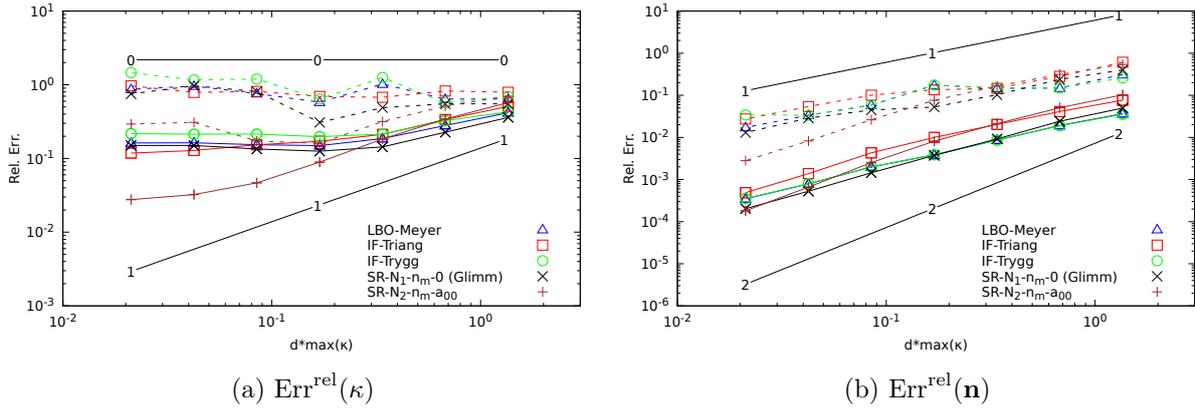


FIGURE 3.25 – Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 0\%$ with Lagrangian transport - $Q > 0$

L_2 -norm and L_∞ -norm. Only the $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$ method sticks out of the others and gives the smallest level of errors on the curvature. The order of convergence, beginning from 1 on coarse meshes, becomes smaller than 1 when refining the mesh.

As usual, the error levels for the normal vector calculation are quite low (Fig. 3.25b), compared to those obtained for the curvature. The approximations based on the smallest stencil provide the best results (LBO-Meyer, IF-Trygg. and $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$). The two other methods, namely IF-Triang. and $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$, give similar errors, slightly larger than the previous ones.

The addition of 20% random perturbations to the initial discretization of the flat surface increases slightly the error levels (Fig. C.5 in C.1). For the curvature evaluation (Fig. C.5a), the $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$ method seems converging with a first order accuracy, except for the two finest meshes for which the error tends to stagnate. This increase in the relative error is found for all the methods, since it is related to a bad approximation of the surface by the discrete mesh, as discussed here-above for $p = 0\%$, and not to the evaluation method of the curvature itself.

Concerning the approximation of the normal vector (Fig. C.5b), the same comments given for $p = 0\%$ apply : except the finest meshes, for which $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$ is the most accurate, the methods based on the smallest stencils (LBO-Meyer, IF-Trygg. and $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$) provide usually the lower errors.

CPU-cost and efficiency

The same analysis, as the one carried out for $Q < 0$ on the relative accuracy versus the CPU-time (Sec. 3.4.2), is now considered (Fig. 3.26). The data of the relative error are extracted from Fig. 3.25. The $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$ method, which was clearly better than the others for estimating the curvature when $Q < 0$, turns out to be also the best choice, even if its efficiency becomes less obvious (Fig. 3.26a). However, this is the only one capable of providing approximations lower than 10% in L_2 -norm, with a L_∞ -norm often very much lower than those given by the other methods.

On the whole, the IF-Trygg. method [123] is the most efficient for the calculation of the normal vector (Fig. 3.26b). It is more than ten times less expensive than $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$ method for coarse meshes, but this gap is closed for the finest surface discretizations. To ensure that the normal vectors are well approximated on all the mesh vertices, the L_∞ -norm must be considered. In that case, only the $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$ method allows getting relative errors lower than 1%. The computation times for disturbed initial meshes with $p = 20\%$ provide similar conclusions (C.1, Fig. C.6).

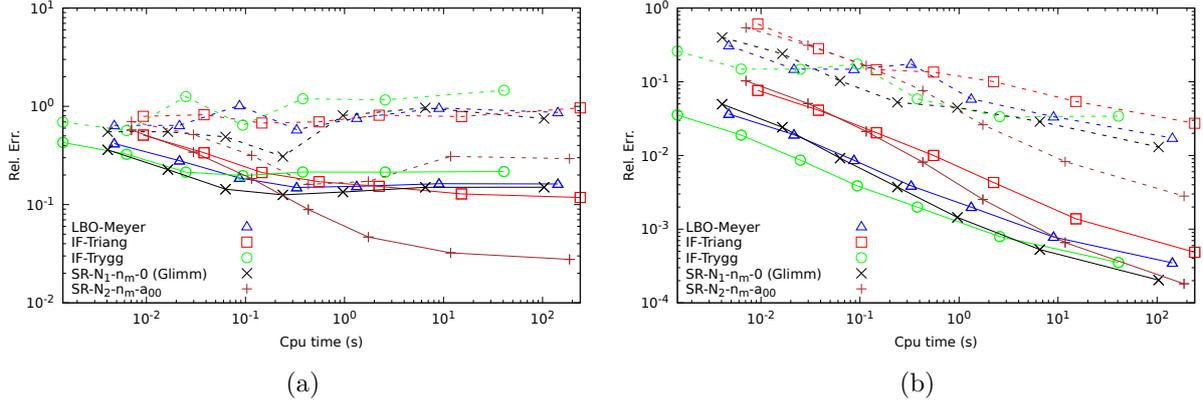


FIGURE 3.26 – Relative errors on κ (a) and \mathbf{n} (b) according to CPU time in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms, $p = 0\%$ - $Q > 0$.

3.4.4 Summary

The robustness of the Surface Reconstruction methods has already been proved for stationary surfaces, regarding the initial disturbances. The key point to get a good approximation remains the evaluation of the curvature of the surface which requires the most restrictive condition on the mesh size. The accounting of the mesh vertex advection by a numerical scheme deteriorates the relative accuracy of the solution whatever the methods to estimate the surface properties. However, the $\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$ method still remains the most competitive. In a more general way, methods using a larger stencil ($\text{SR-}\mathcal{N}_2\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}a_{00}$ and IF-Triang. methods) are the most accurate in the dynamic case with Lagrangian transport.

3.5 Conclusion

Three families of numerical methods have been investigated to evaluate the local curvature and the unit normal vector to a surface. They were compared on steady and unsteady interfaces, the later being newly proposed in the present work. To this end, an original analytical solution of a time dependent surface has been developed. Starting from a flat surface and depending on the direction of the flow rate, a long thin ligament or a hemispherical shape bubble joined at its boundary to a flat surface grows with time. These dynamic surface evaluation problems are interesting as they allow to recover geometrical trends found in real two-phase flows.

A first general conclusion, valid for both static and dynamic surfaces, is that there is no major difficulty to get an accurate approximation of the normal vector. The main issue lies in the curvature calculation. Indeed, its analytical expression is based on second order derivatives and then requires regularity. The Laplace-Beltrami-Operator approximations and the Integral Formulation methods are very accurate and efficient for regular meshes. However, as soon as perturbations are introduced, for example on the equilateral triangle mesh for the stationary surface or through the remeshing procedures (dynamic surfaces) that are used during the time integration to track the surface, the curvature evaluation does not converge any more with the decrease of the mesh size. The third approach, the Surface Reconstruction method, is basically more expensive than the previous popular methods. However, it is more robust and provides better results as soon as the surface mesh evolves or is perturbed. Nonetheless, special cares must be taken for $\text{SR-}\mathcal{N}_1$ methods as it is done in this paper. Their neighbourhood must be extended to the second one when the degree of freedom for reconstructing the surface is not reached. Generally, even if the SR methods are less accurate on coarse meshes, they become more robust with mesh refinement. So, the Surface Reconstruction methods using the first neighbour-

rhod excel in the dynamic case with exact transport, that is the initial and additional vertices brought by the mesh management process are projected back on the exact surface. Whereas the SR- \mathcal{N}_2 methods shine in a more segregate case with Lagrangian transport and mesh perturbation. Although expensive, the Surface Reconstruction methods turn out to be the most efficient methods when the surface is advected : for a given relative accuracy, the CPU-time is often the lowest compared to other methods.

This thoroughly study on the surface geometric properties has emphasized the fact that the remeshing process plays a fundamental role to get a correct evaluation of the curvature. An expected improvement could be to make use of the fitted surface to preserve a good representation of the theoretical one. The new or moved vertices, stemming from the refinement or coarsening step of the discrete mesh, could be projected on the local reconstructed surface in order to preserve a high quality approximation of the analytical surface. Moreover, the approaches used in the Surface Reconstruction methods are the most used and also among the simplest. Other techniques exist (especially in the domain of computer aided graphics that could give better results [14, 95, 100]). However, it has to be noted that all these approaches have to be coupled with Navier-Stokes resolution. Hence, the precision brought by these methods must be compared in light of those used in the Navier-Stokes discretisation.

Bibliographie

Accuracy and convergence of the curvature and normal vector discretizations for 3D static and dynamic front-tracking interfaces

- [10] J. BRACKBILL, D. KOTHE et C. ZEMACH. “A continuum method for modeling surface tension”. In : *J. Comput. Phys.* 100.2 (1992), p. 335-354 (cf. p. 31, 32, 73).
- [13] R. CANU, S. PUGGELLI, M. ESSADKI, B. DURET, T. MÉNARD, M. MASSOT, J. REVEILLON et F. DEMOULIN. “Where does the droplet size distribution come from?” In : *Int. J. Multiphase Flow* 107 (2018), p. 230-245 (cf. p. 36, 72, 73).
- [14] F. CAZALS et M. POUGET. “Estimating differential quantities using polynomial fitting of osculating jets”. In : *Comput. Aided Geom. Des.* 22.2 (2005), p. 121-146 (cf. p. 97).
- [21] J. DELHAYE. “Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 1.3 (1974), p. 395-409 (cf. p. 23, 72).
- [22] F. DEMOULIN, P. BEAU, G. BLOKKEEL, A. MURA et R. BORGHI. “A new model for turbulent flows with large density fluctuations : Application to liquid atomization”. In : *Atomization and Sprays* 17 (2007), p. 315-345 (cf. p. 73).
- [23] M. DESBRUN, M. MEYER, P. SCHRODER et A. BARR. “Implicit fairing of irregular meshes using diffusion and curvature flow.” In : *SIGGRAPH99*. 1999, p. 317-324 (cf. p. 75).
- [26] J. DU, B. FIX, J. GLIMM, X. JIA, X. LI, Y. LI et L. WU. “A simple package for front tracking”. In : *J. Comput. Phys.* 213 (2006), p. 613-628 (cf. p. 29, 33, 73, 78, 79, 83, 85, 90, 92, 107, 161, 163).
- [31] M. ESSADKI. “Contribution to a unified Eulerian modeling of fuel injection : from dense liquid to polydisperse evaporating spray.” Thèse de doct. Université Paris-Saclay, 2018 (cf. p. 75, 76, 81).
- [34] R. FEDKIW, T. ASLAM, B. MERRIMAN et S. OSHER. “A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multi-material flows (the Ghost Fluid method)”. In : *J. Comput. Phys.* 152 (1999). Sous la dir. de J. of COMPUTATIONAL PHYSICS, p. 457-492 (cf. p. 30, 73).
- [45] R. GOLDMAN. “Curvature formulas for implicit curves and surfaces”. In : *Comput. Aided Geom. Des.* 22 (2005), p. 632-658 (cf. p. 34, 78, 79).
- [67] X. LI, G. XU et Y. J. ZHANG. “Localized discrete Laplace-Beltrami operator over triangular mesh”. In : *Computer Aided Geometric Design*. T. 39. 2015, p. 67-82 (cf. p. 73, 80, 88).
- [73] N. MAX. “Weights for computing vertex normals from facets normals.” In : *Journal of Graphics Tools* 4.2 (1999), p. 1-6 (cf. p. 79).
- [74] R. MCDERMOTT et S. POPE. “The parabolic edge reconstruction method (PERM) for Lagrangian particle advection”. In : *J. Comput. Phys.* 227.11 (2008), p. 5447-5491 (cf. p. 49, 89, 92, 94).

- [76] M. MEYER, M. DESBRUN, P. SCHRODER et A. H. BARR. “Discrete Differential-Geometry Operators for Triangulated 2-Manifolds”. In : *Visualization and Mathematics III*. Sous la dir. de H.-C. HEGE et K. POLTHIER. Springer, 2003, p. 35-57 (cf. p. [33](#), [36](#), [75](#), [76](#), [81](#), [85](#), [90](#), [92](#), [107](#), [152](#), [154](#)).
- [77] E. MOHAMED, D. FLORENCE, de CHAISEMARTIN STÉPHANE, L. ADAM, M. THIBAUT et M. MARC. “Statistical modeling of the gas–liquid interface using geometrical variables : Toward a unified description of the disperse and separated phase flows”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 120 (2019), p. 103084 (cf. p. [36](#), [73](#)).
- [91] K. POLTHIER, J. HASS, D. HOFFMAN, A. JAFFE, H. ROSENBERG, R. SCHOEN et M. WOLF. “Computational aspects of discrete minimal surfaces.” In : *Proc. of the Clay Summer school on Global Theory of Minimal Surfaces*. 2002 (cf. p. [75](#)).
- [94] S. POPINET et S. ZALESKI. “A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension.” In : *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 30 (1999), p. 775-793 (cf. p. [76](#), [78](#)).
- [95] H. POTTSMANN, J. WALLNER, Y.-L. YANG, Y.-K. LAI et S.-M. HU. “Principal curvatures from the integral invariant viewpoint”. In : *Comput. Aided Geom. Des.* 24.8 (2007). Discrete Differential Geometry, p. 428-442 (cf. p. [97](#)).
- [99] I. ROGHAIR, V. S. ANNALAND et J. KUIPERS. “An improved Front-Tracking technique for the simulation of mass transfer in dense bubbly flows”. In : *Chem. Eng. Sci.* 152 (oct. 2016), p. 351-369 (cf. p. [50](#), [55](#), [59](#), [89](#)).
- [100] S. RUSINKIEWICZ. “Estimating curvatures and their derivatives on triangle meshes”. In : *Proceedings. 2nd International Symposium on 3D Data Processing, Visualization and Transmission, 2004. 3DPVT 2004*. 2004, p. 486-493 (cf. p. [97](#)).
- [108] S. SHIN et D. JURIC. “Modeling Three-Dimensional Multiphase Flow Using a Level Contour Reconstruction Method for Front Tracking without Connectivity”. In : *J. Comput. Phys.* 180.2 (2002), p. 427-470 (cf. p. [29](#), [73](#)).
- [116] G. TAUBIN. “A signal processing approach to fair surface design.” In : *SIGGRAPH '95*. 1995, p. 351-358 (cf. p. [75](#)).
- [121] P. TRONTIN, S. VINCENT, J. ESTIVALEZES et J. CALTAGIRONE. “A subgrid computation of the curvature by a particle/level-set method. Application to a front-tracking/ghost-fluid method for incompressible flows”. In : *J. Comput. Phys.* 231.20 (2012), p. 6990-7010 (cf. p. [78](#)).
- [122] G. TRYGGVASON, B. BUNNER, A. ESMAEELI, D. JURIC, N. AL-RAWAHI, W. TAUBER, J. HAN, S. NAS et Y.-J. JAN. “A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow”. In : *J. Comput. Phys.* 169.2 (2001), p. 708-759 (cf. p. [29-31](#), [76](#), [77](#)).
- [123] G. TRYGGVASON, R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI. *Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows*. 1^{re} éd. Cambridge University Press, 2011 (cf. p. [31](#), [77](#), [82](#), [85](#), [90](#), [93](#), [95](#), [107](#)).
- [125] G. VAUDOR, T. MÉNARD, W. ANISZEWSKI, M. DORING et A. BERLEMONT. “A consistent mass and momentum flux computation method for two phase flows. Application to atomization process”. In : *Computers and Fluids* 152 (2017), p. 204-216 (cf. p. [73](#)).
- [128] M. WARDETZKY. “Convergence of the Cotangent Formula : An Overview”. In : *Discrete Differential Geometry* 38 (2008), p. 275-286 (cf. p. [88](#)).
- [132] G. XU. “Discrete Laplace–Beltrami operators and their convergence”. In : *Comput. Aided Geom. Des.* 21.8 (2004). Geometric Modeling and Processing 2004, p. 767-784 (cf. p. [88](#)).
- [136] D.-h. YU. *Natural Boundary Integral Method and Its Applications*. T. 539. Mathematics and Its Applications. Springer Netherlands, 2002 (cf. p. [73](#)).

- [138] A. Z. ZINCHENKO, M. A. ROTHER et R. H. DAVIS. “A novel boundary-integral algorithm for viscous interaction of deformable drops.” In : *Phys. Fluids* 9 (1997) (cf. p. [78](#), [79](#), [83](#)).
- [139] D. ZUZIO, J.-L. ESTIVALEZES, P. VILLEDIEU et G. BLANCHARD. “Numerical simulation of primary and secondary atomization”. In : *Comptes Rendus Mécanique* 341 (2013), p. 15-25 (cf. p. [73](#)).

Chapitre 4

Identification d'objets grâce à leurs propriétés surfaciques

Sommaire

4.1	Précision des méth. de calc. de κ sur un nuage de gouttes de forme sphé.	103
4.1.1	Mise en œuvre de l'étude	104
4.1.2	Grandeurs enregistrées	106
4.1.3	Résultats et analyse	106
4.2	Echelles intermédiaires - Caractérisation des ligaments	112
4.2.1	Distribution surfacique de courbure	112
4.2.2	Méthodologie de l'étude numérique	113
4.2.3	Résultats et analyses	119
4.3	Ellipsoïdes déformées par des fonctions sinueuses et variqieuses	126
4.3.1	Déformation sinueuse	130
4.3.2	Déformation variqieuse	134

Nous avons montré dans le chapitre précédent la précision et la robustesse de différentes méthodes de calcul des propriétés géométriques de surface. Ainsi, parmi les trois familles étudiées (LBO, IF, SR), les méthodes de Reconstruction de Surface (SR) s'avèrent les plus fiables pour évaluer les caractéristiques géométriques de surfaces (courbure, normale), et par conséquent pour avoir une bonne estimation des forces de tension de surface. Toutefois, leur rôle ne se limite pas qu'à cela. Ainsi, dans ce chapitre, nous présentons un travail préliminaire dont l'objectif est l'utilisation des méthodes de calcul des propriétés géométriques de surface dans l'identification de formes. La finalité serait d'avoir un système d'apprentissage utilisant une base de données de différentes structures (sphères, ligaments) plus ou moins déformées, qui permettrait d'identifier l'ensemble de formes apparaissant dans un jet atomisé par exemple. Pour ce faire, nous introduisons une quantité basée sur la répartition des courbures de la structure, que nous évaluons sur des formes simples.

4.1 Précision des méthodes de calcul de courbure sur un nuage de gouttes de forme sphérique

En prenant l'exemple d'un jet atomisé, plusieurs échelles sont mises en jeu : les grandes échelles représentées par le jet principal, les échelles intermédiaires qui comprennent des ligaments et des gouttes plus ou moins grosses de forme sphérique ou non. Quant aux petites échelles, elles sont constituées de gouttes de forme sphérique ou quasi-sphérique. L'attention

dans cette partie est portée sur cette dernière classe d'échelles où les forces capillaires dominant, ce qui engendre des structures de forme sphérique. Le but ici est de déterminer la précision des méthodes de calcul de courbure et de vecteur normal pour identifier les gouttes à travers leur courbure moyenne sur l'ensemble des marqueurs constituant le maillage. Ainsi, dans un premier temps, est décrite la mise en œuvre numérique de cette étude, dans laquelle deux paramètres interviennent : la taille et la régularité du maillage de l'interface. Par la suite, les résultats des simulations sont exposés et commentés.

4.1.1 Mise en œuvre de l'étude

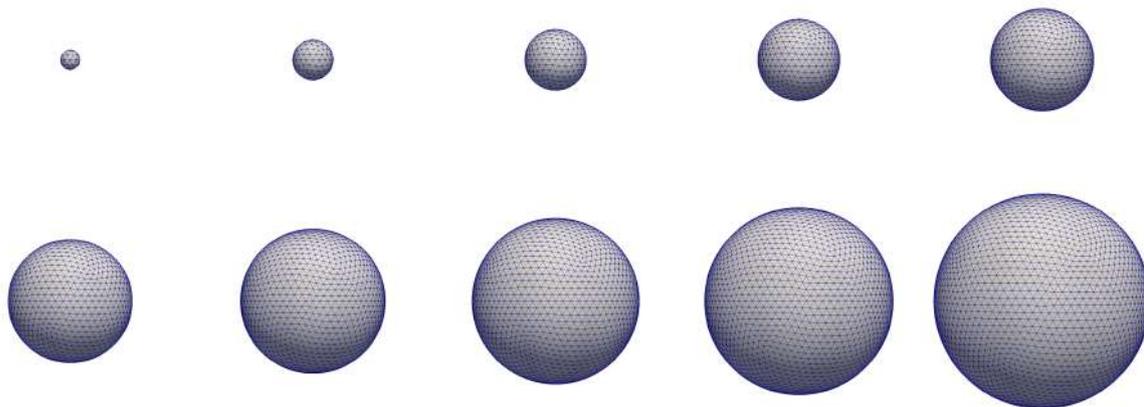


FIGURE 4.1 – Gouttes sphériques avec différentes résolutions de courbure $d_r = 1/2r$, $r = 1, 10$.

Soit une sphère de rayon r . Son interface est initialement discrétisée par des triangles quasi-équilatéraux. Quel que soit le rayon r de la sphère, la taille moyenne d des arêtes des triangles est définie par $d \approx 1/2$. Le paramètre caractéristique le plus important n'est pas la taille d des arêtes ou le rayon r de la sphère mais la résolution d_r de la courbure qui est le rapport entre d et r ($d_r = d/r$), dans notre cas $d_r = 1/2r$. La figure 4.1 présente différentes sphères pour $r \in [1, 10]$.

Afin d'étudier la sensibilité du calcul numérique des courbures, le maillage initialement régulier est perturbé. Ce processus est détaillé dans la section suivante, où on parlera indistinctement de gouttes, bulles ou sphères.



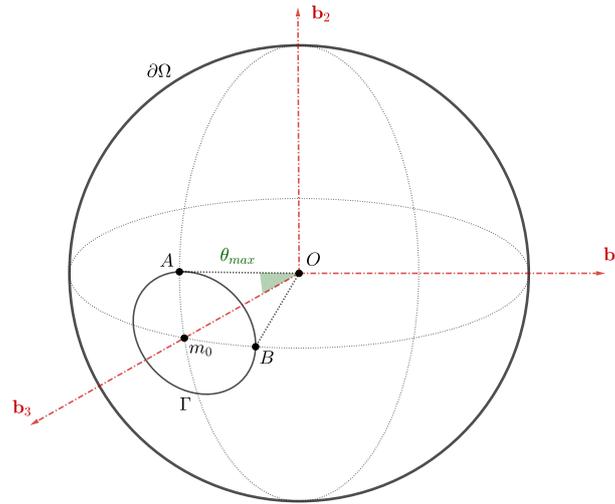
(a) Perturbation $p = 5\%$ et $d_r = 1/16$

(b) Perturbation $p = 40\%$ et $d_r = 1/16$

FIGURE 4.2 – Perturbation maximale du maillage de l'interface de 5% et 40%.

Perturbation du maillage

Soit $m_0 \in \mathcal{M}$ un marqueur de la discrétisation \mathcal{D} de la sphère de résolution de courbure d_r et de surface $\partial\Omega$. Ses coordonnées sont désignées par \bar{x}_{m_0} dans la base canonique $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$

FIGURE 4.3 – Cône dans lequel est déplacé le marqueur m_0 .

de \mathbb{R}^3 , avec $\mathbf{e}_\alpha^\beta = \delta_{\alpha\beta}$. La perturbation est effectuée en se plaçant dans une nouvelle base orthonormée directe $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$, avec comme origine du repère le centre O de la sphère et tel que $\mathbf{b}_3 = \bar{x}_{m_0} / \|\bar{x}_{m_0}\|$ (Fig. 4.3). Le marqueur m_0 est potentiellement bougé dans une calotte sphérique de contour Γ , définie par l'intersection entre la surface $\partial\Omega$ et un cône de sommet O . Il est construit tel que pour tout point $A \in \Gamma$ et de coordonnées \bar{x}_A :

$$\|\bar{x}_{m_0} - \bar{x}_A\|/r = p \cdot d_r$$

avec p l'amplitude maximale de perturbation fixée et d_r la résolution de la courbure de la sphère. Après perturbation, la nouvelle position aléatoire de m_0 (4.1) dans la base $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$ est repérée par (θ, φ) .

$$\bar{x}_{m_0}^{new} = \begin{cases} x = r \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ y = r \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ z = r \cos(\theta) \end{cases} \quad (4.1)$$

Les deux angles sont fonction d'un couple de réels $(\alpha_m, \beta_m) \in [0, 1]^2$ issus d'une distribution uniforme standard et du demi-angle θ_{max} définissant l'ouverture du cône.

$$\begin{aligned} \theta &= \alpha_m \theta_{max} \\ \varphi &= \beta_m 2\pi \end{aligned} \quad (4.2)$$

Un dernier changement de base est effectué pour revenir dans la base canonique de \mathbb{R}^3 .

Calcul de θ_{max} : il est évalué en se servant du triangle formé par les points O , A et de la position initiale du marqueur m_0 .

$$\begin{aligned} \cos(\theta_{max}/2) &= \frac{[r^2 - p^2 \cdot d^2/4]^{1/2}}{r} \\ &= \left[1 - \frac{p^2 \cdot d_r^2}{4} \right]^{1/2} \\ \sin(\theta_{max}/2) &= \frac{p \cdot d_r}{2} \end{aligned}$$

La formule trigonométrique $\cos(a + b) = \cos(a)\cos(b) - \sin(a)\sin(b)$ permet d'obtenir :

$$\begin{aligned}\cos(\theta_{max}) &= \left[1 - \frac{p^2 \cdot d_r^2}{2} \right] \\ \theta_{max} &= \arccos \left[1 - \frac{p^2 \cdot d_r^2}{2} \right]\end{aligned}\quad (4.3)$$

4.1.2 Grandeurs enregistrées

Soit une sphère de résolution de courbure d_r fixée. Nous rappelons que $d_r = d/r$, avec d la taille des arêtes de triangles du maillage de l'interface avant perturbation et r le rayon de la sphère. Pour une résolution de courbure donnée, 10^5 sphères sont construites, chacune avec un maillage aléatoire issu d'une distribution uniforme standard et une perturbation maximale fixée ($p \in [0, 0.4]$), comme décrit dans la section 4.1.1. Nous notons $\mathcal{M}_r^{(i)}$ l'ensemble des marqueurs m de la i -ème sphère de résolution de courbure d_r , $i \in \llbracket 1, 10^5 \rrbracket$. Ensuite, pour chaque sphère de rang i et de résolution d_r est définie la quantité $\langle \kappa \rangle_r^{(i)}$, moyenne arithmétique des courbures en chaque marqueur de l'interface de la sphère (4.4) i .

$$\langle \kappa \rangle_r^{(i)} = \sum_{m \in \mathcal{M}_r^{(i)}} \kappa_m / \text{card}(\mathcal{M}_r^{(i)}) \quad (4.4)$$

L'écart relatif à la courbure exacte $d_r/d = 1/r$ est alors :

$$Err(\langle \kappa \rangle_r^{(i)}) = \left(\langle \kappa \rangle_r^{(i)} d/d_r - 1 \right) \quad (4.5)$$

L'objectif est de voir la répartition (ou PDF) de l'écart entre cette moyenne arithmétique des courbures sur une sphère et sa courbure exacte sur une population de 10^5 sphères. L'impact sur cette distribution de l'amplitude maximale p des perturbations du maillage, de la résolution d_r de la courbure et du choix des méthodes de calculs des courbures en chaque marqueur est également discuté.

4.1.3 Résultats et analyse

Les graphes présentés dans cette section donnent les distributions des erreurs relatives (4.5) sur les 10^5 sphères pour les différents niveaux d_r de raffinement du maillage et de l'amplitude p de la perturbation.

Influence de la résolution d_r de courbure

La résolution de la courbure est définie par le paramètre d_r qui représente le rapport de la taille des arêtes d'un triangle sur le rayon de la sphère. Les simulations ont été menées pour $d_r = 1/2r$, $r = 1, 10$ et $p \in \{5\%, 20\%, 40\%\}$. Les résultats pour $r \in \{2, 4, 8\}$ sont présentés par la suite, les autres suivant la même tendance.

Dans un cadre idéal, à savoir un maillage de l'interface constitué de triangles quasi-équilatéraux dans le cas $p = 5\%$, les méthodes les plus adaptées pour identifier des sphères sont LBO-Meyer, IF-Triangle, et IF-Trygg, avec une erreur relative inférieure à 1%, quelle que soit la résolution d_r (Fig. 4.4). Ensuite viennent les méthodes SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 et SR- \mathcal{N}_2 - \mathbf{n}_m -0, qui pour de faibles résolutions ($d_r = 1/4$) ont une erreur comprise entre 2% et 9% (Fig. 4.4a). Cette erreur diminue avec le raffinement du maillage de l'interface, pour descendre en dessous de 0.6% quand

$d_r = 1/16$ (Fig. 4.4c).

L'introduction de perturbations ($p = 20\%$) baisse la précision des méthodes LBO-Meyer, IF-Triangle et IF-Trygg. Pour de faibles résolutions ($d_r = 1/4$), elles restent les mieux appropriées pour identifier une goutte sphérique (Fig. 4.5a). Par contre, elles ne convergent pas avec les maillages, voire divergent pour certains. Ainsi, pour les différents maillages $d_r \in \{1/4, 1/8, 1/16\}$, les valeurs moyennes de la distribution pour LBO-Meyer restent autour de 0.1%. Elles sont respectivement de 0.5%, 0.8% et 0.9% pour IF-Triangle, et de 2%, 2.3% et 2.4% pour IF-Trygg (Fig. 4.5). Les méthodes SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 et SR- \mathcal{N}_2 - \mathbf{n}_m -0, quant à elles, convergent avec le maillage, avec un ordre de convergence de 2 : pour SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0, les valeurs moyennes de distribution de l'erreur relative sont d'environ 2%, 0.5% et 0.12% ; elles sont de 8%, 2% et 0.5% pour SR- \mathcal{N}_2 - \mathbf{n}_m -0. Ces écarts entre SR- \mathcal{N}_1 et SR- \mathcal{N}_2 se justifient par le fait que SR- \mathcal{N}_2 possède un stencil plus étendu. Cela a pour avantage de régulariser d'éventuels bruits sur l'interface, mais comporte la contrepartie d'être moins local et de ce fait être moins précis.

L'introduction de perturbations nous a montré que la hiérarchie que nous avons pour de faibles perturbations (LBO et IF prédominants à $p = 5\%$, Fig. 4.4) a été chamboulée pour des perturbations plus importantes (SR et LBO prédominants à $p = 20\%$, Fig. 4.5). D'où l'importance d'étudier l'influence des perturbations sur ces tests.

Influence de la perturbation p

Cette partie est consacrée à l'impact de la perturbation p du maillage de l'interface sur la distribution de l'écart relatif à la courbure exacte. Trois amplitudes de perturbations sont effectuées : $p \in \{0.05, 0.2, 0.4\}$. La résolution initiale de la courbure est $d_r = 1/20$. Les résultats sont présentés sur la figure 4.6.

Pour de faibles perturbations $p = 5\%$, toutes les méthodes sont équivalentes, et ont une erreur relative $Err(< \kappa >) \leq 0.4\%$ (Fig. 4.6a). En effet, la forme des triangles équilatéraux initiaux est peu perturbée, ce qui est avantageux pour les méthodes LBO-Meyer [76], IF-Triangle et IF-Trygg [123]. Ces dernières dépendent fortement de la qualité du maillage. Quant aux méthodes de Reconstruction de Surface SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 [26] et SR- \mathcal{N}_2 - \mathbf{n}_m -0, la densité de marqueurs pour représenter la surface est l'élément prépondérant dans la qualité de l'évaluation des propriétés géométriques de la surface. Ainsi, la résolution $d_r = 1/20$, à savoir la taille des arêtes des triangles vaut $1/20$ du rayon r de la sphère, est suffisante pour avoir une erreur inférieure à 0.4%.

L'augmentation de la perturbation p a une double influence sur les distributions.

- Les méthodes LBO-Meyer, IF-Triangle et IF-Trygg voient leur erreur moyenne de la distribution s'écarter de 0%. En d'autres termes, elles deviennent moins précises. Ainsi, au maximum de perturbation $p = 40\%$, les moyennes de distributions de LBO-Meyer, IF-Triangle et IF-Trygg deviennent respectivement 1%, 2% et 5.5% (Fig. 4.6c). En effet, les perturbations brisent la forme équilatérale des triangles, à laquelle sont sensibles ces méthodes. En ce qui concerne les méthodes de Reconstruction de Surface, elles sont peu, voire pas impactées.
- En plus de l'augmentation de la valeur moyenne de la distribution, les perturbations étalent la distribution pour les méthodes LBO-Meyer, IF-Triangle et IF-Trygg (Fig. 4.6b et 4.6c). Comme précédemment, les méthodes SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 et SR- \mathcal{N}_2 - \mathbf{n}_m -0 ne sont pas impactées.

Cela vient confirmer les conclusions du chapitre 3 sur la sensibilité des méthodes LBO et IF à la qualité des triangles du maillage de l'interface. Ces dernières dépendent fortement de la forme des triangles reliés au marqueur considéré. Elles donnent de bons résultats lorsque les triangles sont presque équilatéraux, mais ont des résultats dégradés dès que l'on s'écarte de cette configuration idéale.

Conclusion

L'étude de la précision des méthodes quant à l'identification d'une population de 10^5 gouttes sphériques montre que pour des résolutions de courbure d_r grossières, la méthode LBO-Meyer est celle qui donne de meilleurs résultats. Par contre, si on veut s'affranchir de l'influence des perturbations du maillage, qui est incontournable lors de la simulation d'écoulements diphasiques, et contrôler les erreurs, le choix est porté sur les méthodes de Reconstruction de Surface, dans ce cas-ci SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 et SR- \mathcal{N}_2 - \mathbf{n}_m -0.

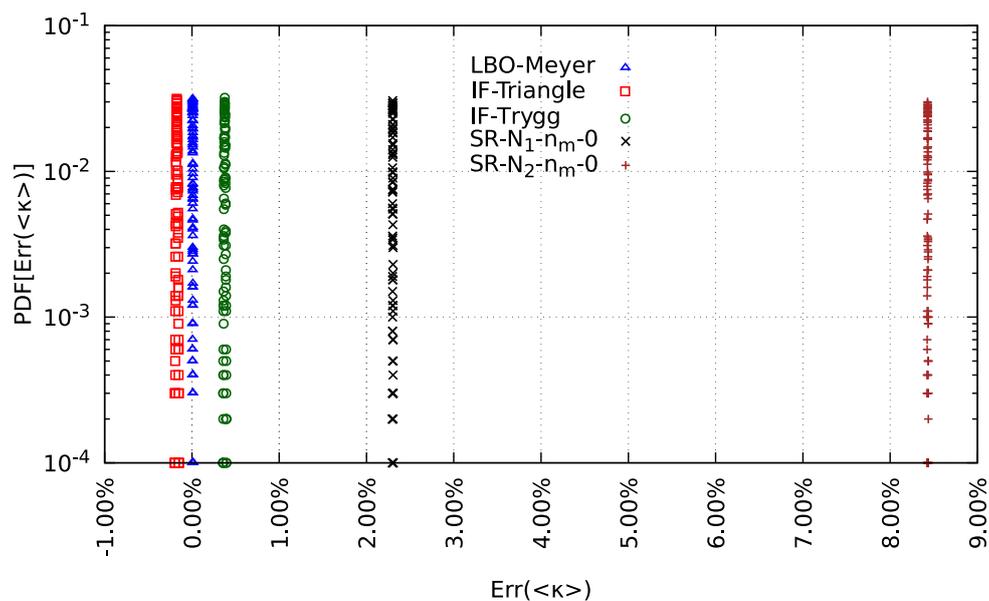
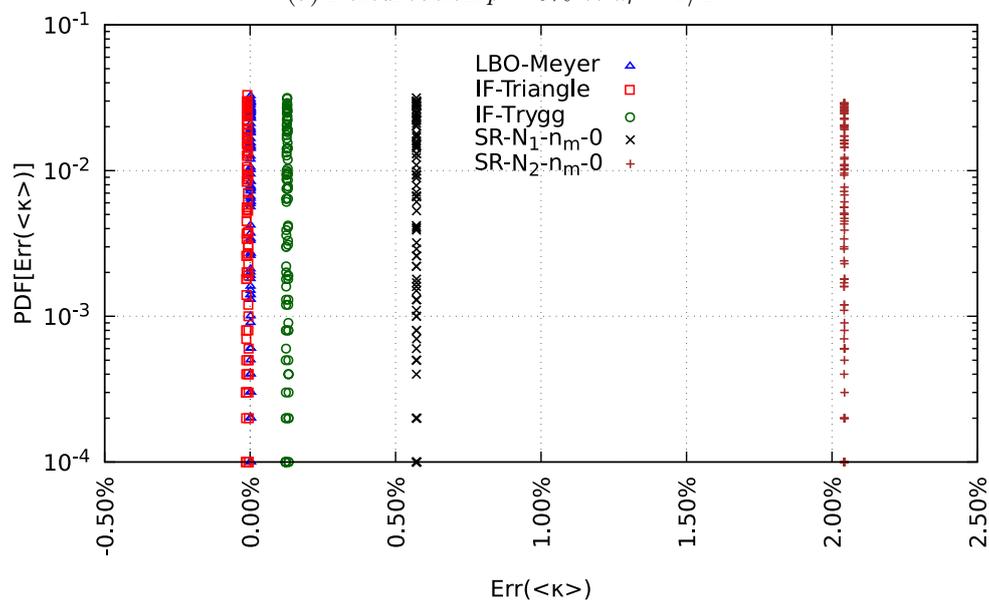
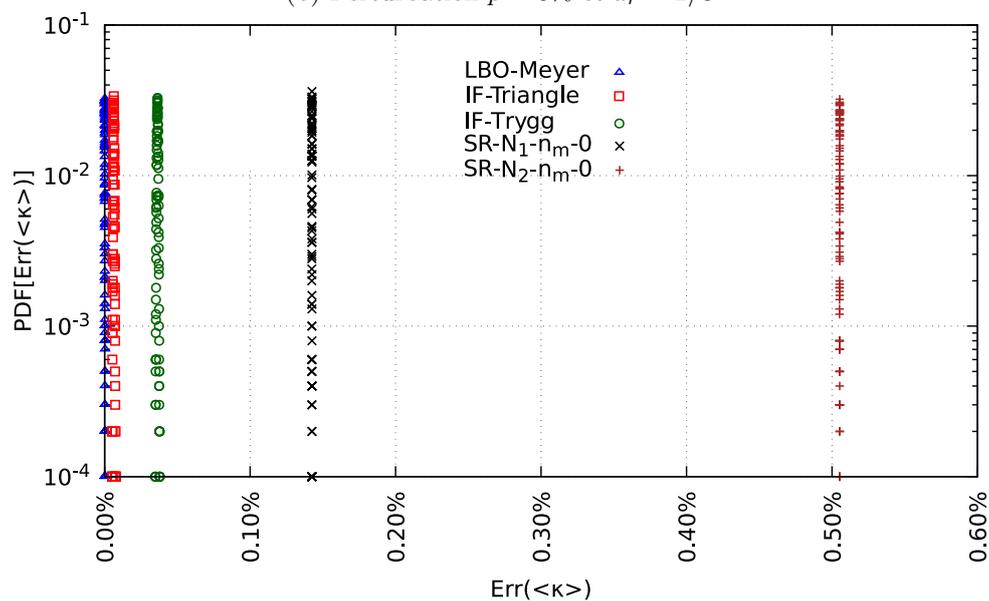
(a) Perturbation $p = 5\%$ et $d_r = 1/4$ (b) Perturbation $p = 5\%$ et $d_r = 1/8$ (c) Perturbation $p = 5\%$ et $d_r = 1/16$

FIGURE 4.4 – Influence de la résolution de la courbure : PDF de l'écart relatif $Err(\langle \kappa \rangle)$, pour différentes résolutions d_r et une perturbation $p = 5\%$.

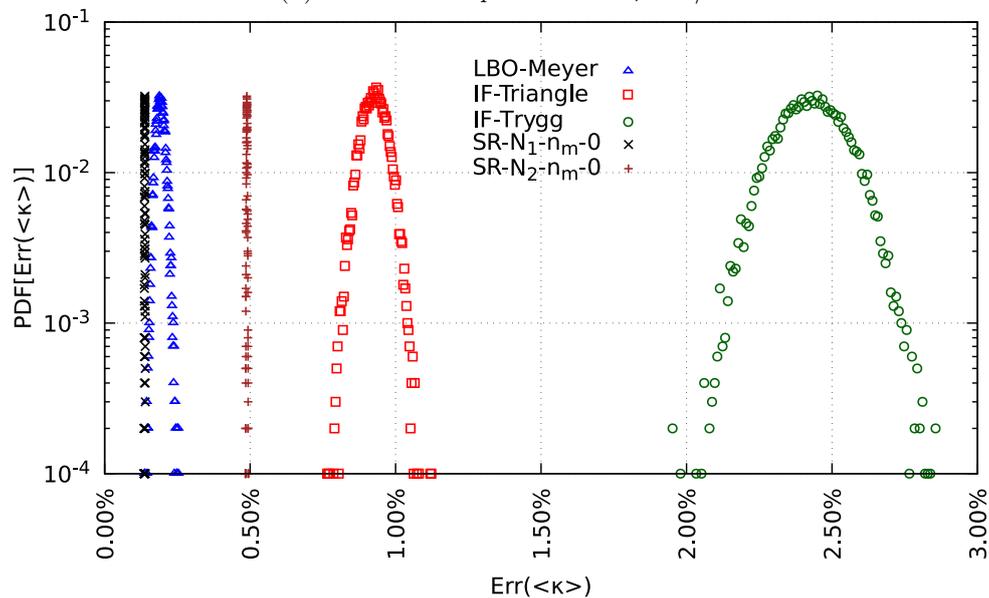
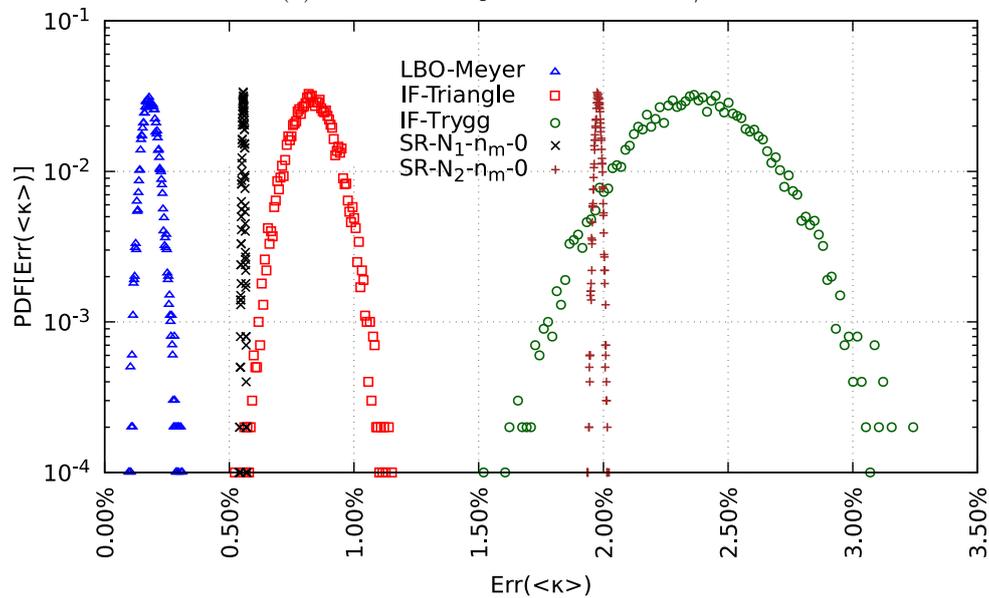
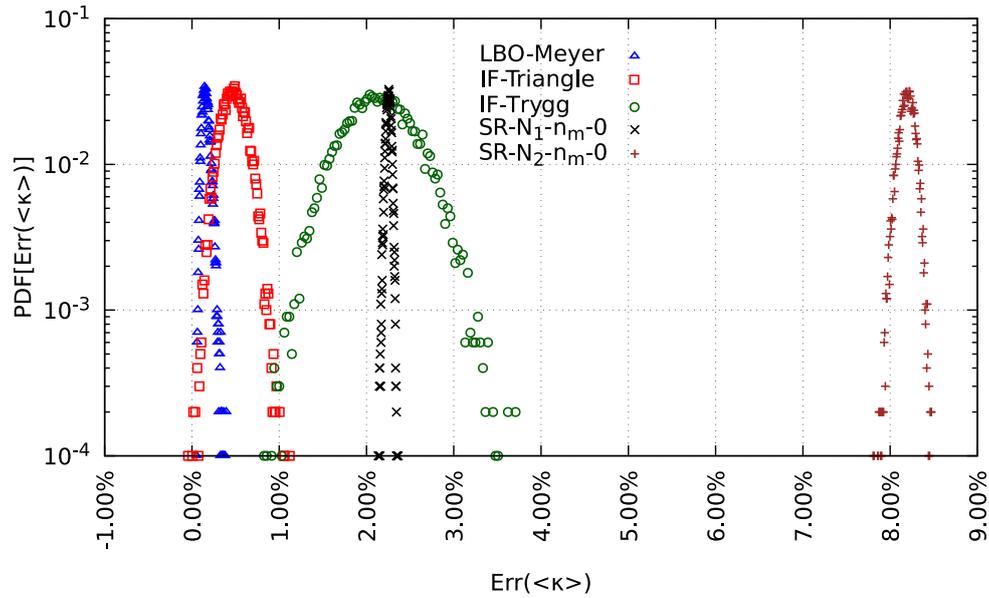


FIGURE 4.5 – Influence de la résolution de la courbure : PDF de l'écart relatif $Err(<math>\kappa>)$, pour différentes résolutions d_r et une perturbation $p = 20\%$.

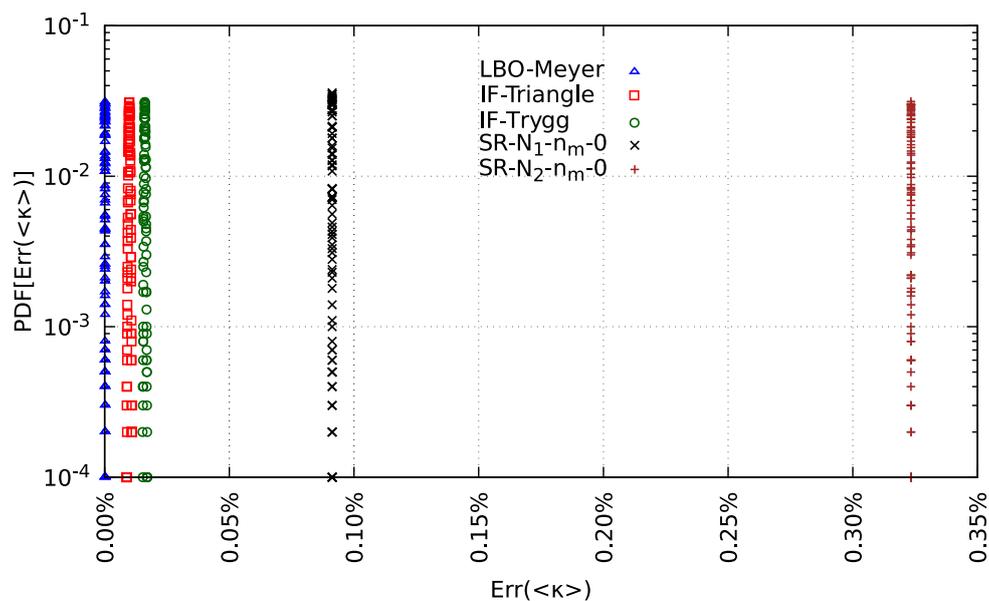
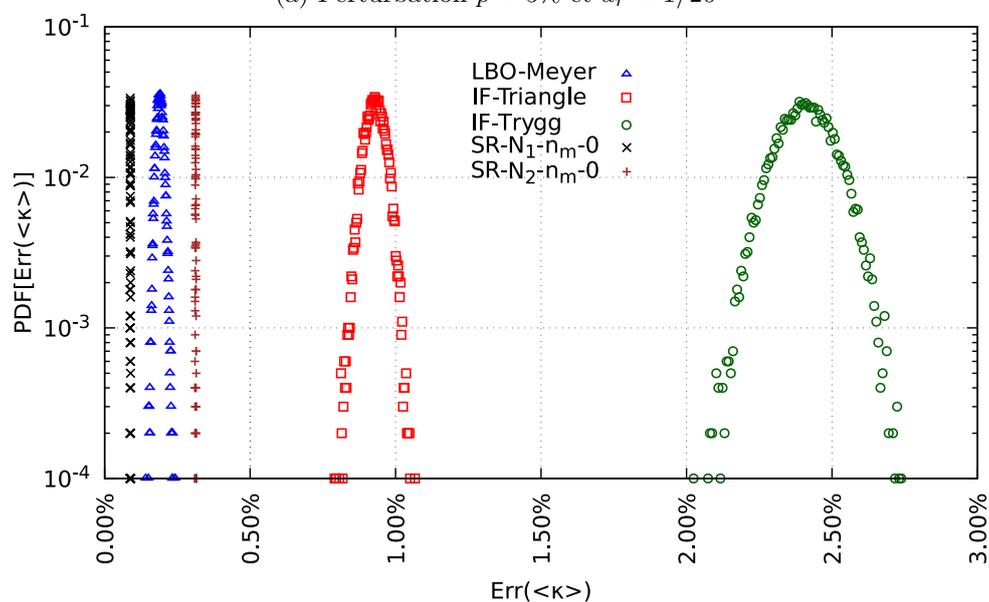
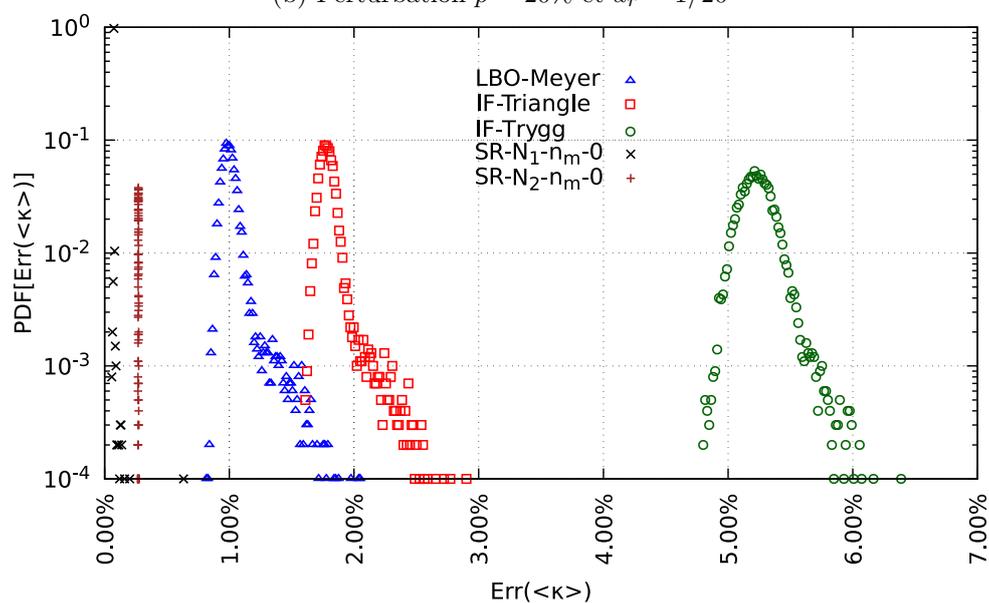
(a) Perturbation $p = 5\%$ et $d_r = 1/20$ (b) Perturbation $p = 20\%$ et $d_r = 1/20$ (c) Perturbation $p = 40\%$ et $d_r = 1/20$

FIGURE 4.6 – Influence de la perturbation p : PDF de l'écart relatif $Err(<math>\kappa>)$, pour différentes perturbations p et une résolution de courbure $d_r = 1/20$.

4.2 Echelles intermédiaires - Caractérisation des ligaments

Précédemment, nous nous sommes intéressés aux petites échelles constituées de gouttes sphériques. Cette partie, centrée sur les ligaments, est une approche préliminaire dans l'identification à travers la caractérisation de ces structures. Nous présenterons, dans un premier temps, la distribution surfacique de la courbure moyenne, élément que nous utiliserons pour caractériser les formes rencontrées. Cette distribution est par la suite testée sur des formes simples, à savoir des sphères déformées progressivement en ellipsoïdes. Un degré de complexité est apporté en introduisant des déformations sinueuses et variqueuses aux structures ellipsoïdales formées.

4.2.1 Distribution surfacique de courbure

Soit un domaine Ω de surface $\partial\Omega$. La distribution surfacique de courbure représente la fraction de la surface $\partial\Omega$ pour laquelle la courbure moyenne est la même. Avant de présenter cette grandeur, nous introduisons une quantité beaucoup plus générale notée $DF_G(\eta)$ (DF pour *density function*). Elle représente la distribution associée à la fonction G et la quantité η . Elle est définie par la relation (4.6).

$$\forall \eta \in \mathbb{R}, \quad DF_G(\eta) = \left[\int_{\mathbb{R}} G(\hat{\eta}) \delta(\hat{\eta} - \eta) d\hat{\eta} \right] / \int_{\mathbb{R}} G(\hat{\eta}) d\hat{\eta} \quad (4.6)$$

avec $\eta \in \{\kappa, \kappa_G, \kappa_{min}, \kappa_{max}\}$, G une fonction travaillant sur la quantité η . Nous choisissons de travailler par la suite avec $\eta = \kappa$. Aussi, selon les valeurs de la fonction G , nous pouvons étudier différents cas de figure :

- $G(\kappa) = 1$: En utilisant la constante 1, la distribution $DF_{\mathbb{1}}(\kappa)$ donne l'occurrence ou le nombre de sommets possédant cette courbure κ sur le domaine étudié.
- $G(\kappa) = S(\kappa)$: Nous retrouvons ici la distribution surfacique de courbure. Avec $S(\kappa)$ la surface de courbure κ , $DF_S(\kappa)$ représente la fraction de surface de courbure moyenne κ .

Dans notre étude, la surface $\partial\Omega$ possède une discrétisation \mathcal{D} , avec \mathcal{M} l'ensemble des marqueurs m . La relation (4.6) a besoin d'être adaptée à cette discrétisation. Les différentes grandeurs continues et leurs contreparties discrètes sont rassemblées dans le tableau 4.1.

Titre	Continue	Discret
Distribution	$DF_G(\kappa)$	$df_G(\kappa)$
Courbure	κ	$\kappa_m, m \in \mathcal{M}$
Fonction de κ	$G(\kappa)$	$G_m, m \in \mathcal{M}$
Domaine de définition	$\mathbb{R}, d\kappa$	$I_\kappa = \{\kappa_m, m \in \mathcal{M}\}$
		N_c , classes (ou subdivisions) de I_κ
		$\Delta\kappa = [\max(I_\kappa) - \min(I_\kappa)] / N_c$
Dirac	$\delta(\kappa - \hat{\kappa})$	$\Pi[(\kappa_m - \hat{\kappa}) / \Delta\kappa] / \Delta\kappa$

TABLE 4.1 – Discrétisation des termes de la distribution $DF_G(\kappa)$.

Ainsi, les grandeurs continues $(\kappa, G(\kappa))$ sur la surface $\partial\Omega$ deviennent des valeurs discrètes (κ_m, G_m) sur les marqueurs $m \in \mathcal{M}$. L'intervalle I_κ des valeurs possibles de κ est subdivisé

en N_c classes de courbure $\hat{\kappa}$ de taille $\Delta\kappa$ constante. Les classes de courbures $\hat{\kappa}$ constituent donc des sous-ensembles de I_κ ($\hat{\kappa} \subset I_\kappa$). En dehors de cet intervalle, la fonction $G(\kappa)$ est nulle. La classe de courbure $\hat{\kappa}$ représente l'ensemble des courbures comprises dans l'intervalle $[\hat{\kappa} - \Delta\kappa/2, \hat{\kappa} + \Delta\kappa/2]$. Par la suite, $\hat{\kappa}$ désignera indistinctement cet intervalle et le milieu de cet intervalle. La distribution de Dirac δ est approximée par le rapport de la fonction porte Π et de la taille $\Delta\kappa$ des classes de courbures. La fonction porte est définie par la relation (4.7).

$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad \Pi(t) = \begin{cases} 1 & \text{pour } t \in [-0.5, 0.5] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.7)$$

Dans le cas de la distribution surfacique de courbure où $G(\kappa) = S(\kappa)$, nous choisissons de construire la surface discrète S_m autour du marqueur m comme étant l'aire composite \mathcal{A}_{mixed} de la méthode LBO-Meyer, définie dans la section 3.2.2, page 75.

$$S_m = \mathcal{A}_{mixed} \quad (4.8)$$

Cette surface est construite en se servant du marqueur m , du milieu des arêtes reliées à m et d'un dernier point dépendant de la forme des triangles. Ainsi, sur un triangle aigu, il correspond au centre du cercle circonscrit (Fig. 3.2a, page 76). Dans le cas de triangles obtus, c'est le milieu de l'arête opposée au sommet d'angle obtus qui est pris en compte (Fig. 3.2b, page 76). Pour tout $m \in \mathcal{M}$, les surfaces S_m sont disjointes et leur somme est égale à la surface totale discrète S_{tot} .

$$S_{tot} = \sum_{m \in \mathcal{M}} S_m \quad (4.9)$$

L'ensemble de ces notations nous permet de poser la discrétisation de la relation (4.6) selon le choix de $G(\kappa)$.

$$df_{\mathbb{1}}(\hat{\kappa}) = \frac{\sum_{m \in \mathcal{M}} \Pi[(\kappa_m - \hat{\kappa})/\Delta\kappa]}{\sum_{m \in \mathcal{M}} \Delta\kappa} \quad (4.10)$$

$$df_S(\hat{\kappa}) = \frac{\sum_{m \in \mathcal{M}} S_m \Pi[(\kappa_m - \hat{\kappa})/\Delta\kappa]}{\sum_{m \in \mathcal{M}} S_m \Delta\kappa} \quad (4.11)$$

Ainsi, pendant que la distribution $df_{\mathbb{1}}(\hat{\kappa})$ décompte la proportion du nombre de marqueurs ayant une courbure $\kappa_m \in \hat{\kappa}$, la distribution $df_S(\hat{\kappa})$ relève la portion de surface dont la courbure est comprise dans la classe de courbure $\hat{\kappa}$.

4.2.2 Méthodologie de l'étude numérique

La distribution df_G définie précédemment (4.10-4.11) est utilisée pour caractériser des ligaments. Ces derniers pouvant être de formes diverses et variées, la densité df_G est d'abord testée sur des formes simples, à savoir une famille d'ellipsoïdes.

	$\alpha = 20\%$			$\alpha = 80\%$			$\alpha = 140\%$		
κ_{min}	0.8647			0.7858			0.8306		
κ_{max}	1.44			3.24			5.76		
$1/d_{r_0}$	nbsom	nbele	S_{tot}	nbsom	nbele	S_{tot}	nbsom	nbele	S_{tot}
4	162	320	12.47	408	812	13.86	2110	4216	18.81
8	642	1280	12.66	1025	2046	14.01	3251	6498	15.72
16	2562	5120	12.71	3505	7006	14.06	6750	13496	15.73
32	10242	20480	12.72	13875	27746	14.08	21669	43334	15.74
64	40962	81920	12.73	55547	111090	14.08	86597	173190	15.74
128	163842	327680	12.73	223832	447660	14.08	340374	680742	15.74
256	655362	1310720	12.73	901619	1803234	14.08	1363294	2726584	15.74
512	2621442	5242880	12.73	3610158	7220312	14.08	5441908	10883812	15.74

TABLE 4.2 – Évolution du nombre $nbsom$ de sommets, $nbele$ d'éléments, de la surface S_{tot} et des courbures κ_{min} et κ_{max} pour les ellipsoïdes d'étirement $\alpha \in \{20\%, 80\%, 140\%\}$ en fonction de la résolution de courbure d_{r_0} de la sphère initiale servant à les engendrer.

Construction de la famille d'ellipsoïdes

La famille d'ellipsoïdes est formée en partant d'une sphère de rayon r_0 . La sphère est étirée dans la direction x et contractée dans les deux autres directions y et z . Le volume est conservé entre la sphère initiale et les ellipsoïdes résultantes dans l'optique de pouvoir les comparer. Ainsi, considérons $m \in \mathcal{M}$, un marqueur de la discrétisation \mathcal{D} de la sphère de rayon r_0 , et de coordonnées \bar{x}_m . La résolution de courbure est notée d_{r_0} . Nous rappelons que $d_{r_0} = d/r_0$, avec d la taille des arêtes des triangles discrétisant la surface. Des perturbations d'amplitude maximale $p \in [0, 0.4]$ sont appliquées sur le maillage de la sphère initiale, comme décrit dans la section 4.1.1. Un étirement du maillage d'amplitude $\alpha \in [0.05, 1.4]$ est opéré dans la direction x , de telle sorte que les coordonnées \bar{x}_m de m vérifient la relation (4.12) :

$$\bar{x}_m/r_0 = \begin{cases} x &= a \sin(\theta) \cos(\varphi)/r_0 \\ y &= b \sin(\theta) \sin(\varphi)/r_0 \\ z &= b \cos(\theta)/r_0 \end{cases} \quad (4.12)$$

avec a et b respectivement le demi-grand axe et le demi-petit axe de l'ellipsoïde, et :

$$a/r_0 = (1 + \alpha) \quad , \quad b/r_0 = 1/(1 + \alpha)^{1/2} \quad (4.13)$$

Le jeu de paramètres définissant les ellipsoïdes se résume donc au triplet $\{d_{r_0}, p, \alpha\}$, avec d_{r_0} pour la résolution de la courbure et le calcul du volume, p la perturbation du maillage et α l'étirement. Les différentes ellipsoïdes de la famille sont construites à partir de la précédente (Fig. 4.7). Ainsi, l'ellipsoïde d'étirement α_n est générée en se servant de celle d'étirement précédent α_{n-1} ($\alpha_{n-1} < \alpha_n$). A chaque étape, les procédures de gestion du maillage sont appliquées (enrichissement, désenrichissement, lissage, échange d'arêtes), comme présentées dans les sections 2.3-2.5, pp 49-57.

Choix du nombre N_c de classes de courbures

Comme évoqué dans le tableau 4.1, le passage de la version continue à la formulation discrète de la distribution df_G nous amène à subdiviser l'intervalle I_k des courbures des ellipsoïdes en N_c classes de courbures de même largeur $\Delta\kappa$. Afin de déterminer le nombre de classes pour lequel on a une convergence de la distribution df_G , nous nous intéressons à l'évolution de la distribution

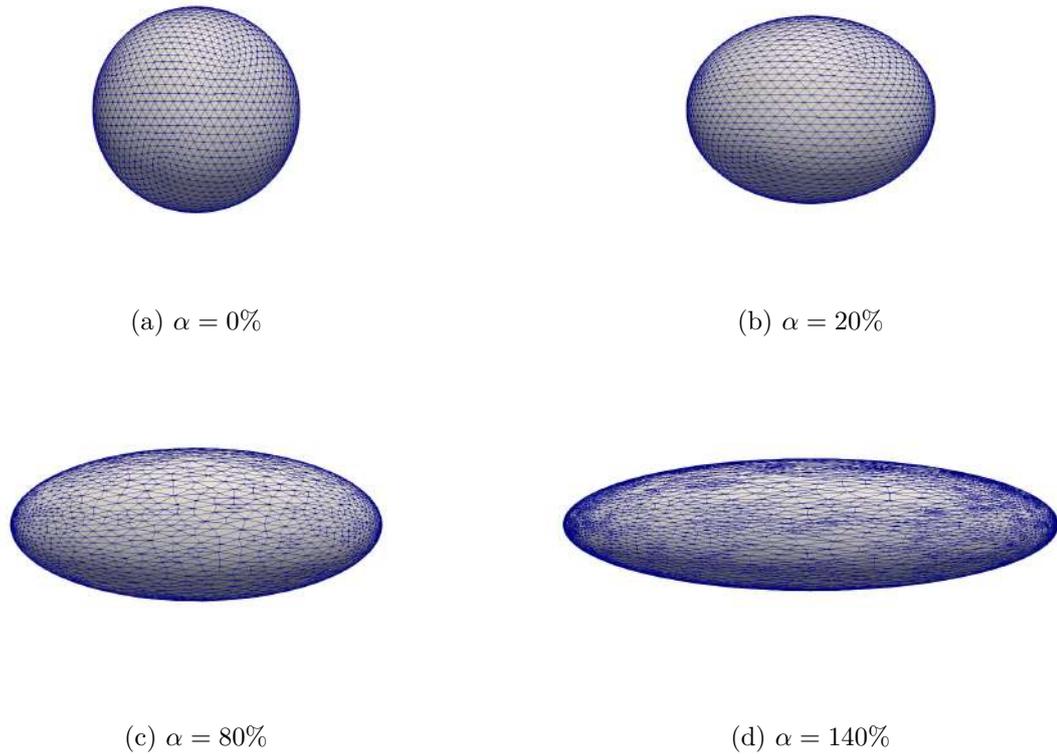


FIGURE 4.7 – Formation de la famille d’ellipsoïdes à partir d’une sphère de résolution $d_{r_0} = 1/16$.

df_G en fonction du nombre de classes N_c . Cette convergence est étudiée pour la distribution surfacique (df_S) et la distribution de décompte (df_{\perp}), et l’évolution de df_G pour chaque classe $\hat{\kappa}$ de courbure est regardée.

Ainsi, soit un ellipsoïde de paramètres $\{d_{r_0}, p, \alpha\}$ donnés. Un nombre initial de classes N_c^0 de courbures est fixé, et la distribution df_G pour chacune des classes de courbures est évaluée. A l’étape suivante, chaque classe $\hat{\kappa}$ de courbure est subdivisée en 3. Rappelons que $\hat{\kappa}$ désigne indistinctement l’ensemble des courbures dans l’intervalle $[\hat{\kappa} - \Delta\kappa/2, \hat{\kappa} + \Delta\kappa/2]$ et le milieu de cet intervalle. Subdiviser cet intervalle en 3 permet donc de garder $\hat{\kappa}$ centré dans le nouvel intervalle à l’itération suivante et de suivre la même classe de courbure au fur et à mesure que le nombre N_c de classes augmente (ou que la taille de classe $\Delta\kappa$ diminue sachant que $\Delta\kappa = [\max(I_{\kappa}) - \min(I_{\kappa})]/N_c$). Les tests présentés ont été effectués sur un ellipsoïde de paramètres $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 140\%\}$. La méthode utilisée pour évaluer les courbures est SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0. La résolution de courbure $d_{r_0} = 1/256$ permet de s’affranchir des effets du maillage. Quant aux étirements α inférieures, les conclusions sont les mêmes.

Trois classes de courbure $\hat{\kappa} \in \{1.65, 3.3, 4.94\}$ sont étudiées. Ces classes sont caractéristiques des faibles courbures, des courbures intermédiaires et des fortes courbures rencontrées sur cet ellipsoïde. Les conclusions sont les mêmes pour les autres classes $\hat{\kappa}$ de courbure. L’évolution de la distribution df_G pour chaque classe montre une droite constante caractéristique d’une indépendance en fonction du nombre de classe N_c (ou de la taille de classe $\Delta\kappa$). Nous présentons ces résultats sur la figure 4.8. Nous remarquons que, quelle que soit la classe concernée, pour un nombre de classes compris entre 10 et 10^4 , df_G reste constant. Toutefois, des variations apparaissent pour un faible nombre de classes ($N_c = 3$) de courbures et également pour un nombre élevé ($N_c > 10^4$). Dans le premier cas, cela s’explique par une discrétisation grossière de l’intervalle des courbures. Dans le second cas, cela est dû à la trop grande quantité de classe par rapport à la finesse du maillage de l’interface. Le nombre de points dans une classe tend alors

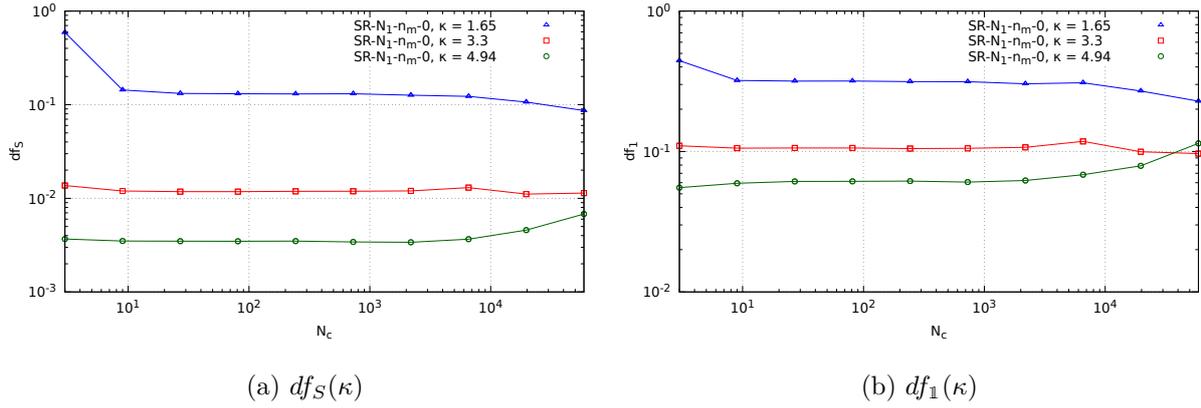


FIGURE 4.8 – Évolution de df_G en fonction du nombre N_c de classes de courbure pour un ellipsoïde de paramètres $d_{r_0} = 1/256$, $p = 0\%$, $\alpha = 140\%$.

vers l'unité, ce qui engendre de forte variation dans l'évolution de df_G et une sous-représentation statistique des classes considérées.

L'évolution de df_G étant constante pour des valeurs raisonnables de N_c (entre 10 et 10^4), nous choisissons de fixer $N_c = 20$ pour la suite de l'étude. Un exemple de ce découpage est donné sur la figure 4.9. Nous aurons à travailler avec des ellipsoïdes de résolution beaucoup plus faible que celle présentée actuellement. Ainsi, la valeur de $N_c = 20$ qui fait partie des limites inférieures pour la résolution de courbure $d_{r_0} = 1/256$ deviendra une limite supérieure au fur et à mesure que la résolution du maillage baisse. Prendre une valeur plus grande dégraderait les résultats de la df_G sur des maillages grossiers.

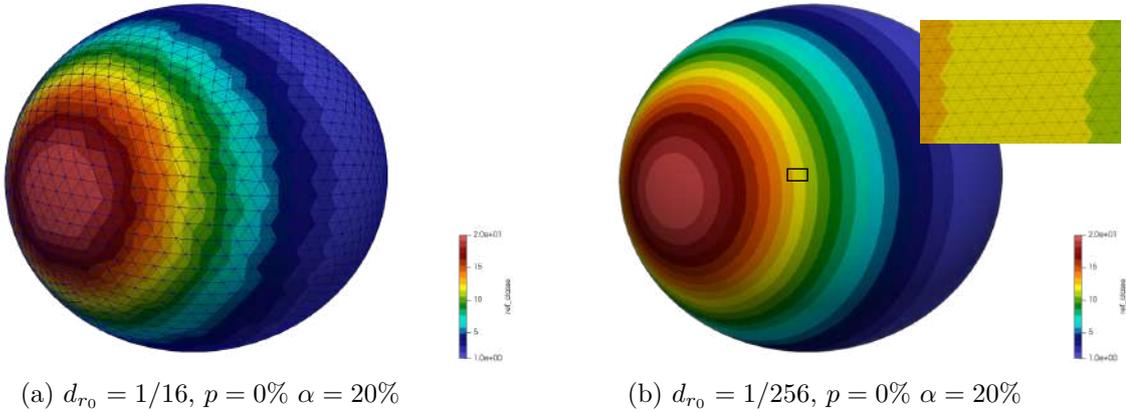


FIGURE 4.9 – Représentation des $N_c = 20$ classes de courbures sur un ellipsoïde d'étirement $\alpha = 20\%$ et de résolution de courbure. Dans la figure de droite, un zoom sur une classe de courbure (petit rectangle noir) permet de voir le maillage de l'interface.

Choix de la distribution et de la représentation

Comme mentionné dans la section 4.2.1, le choix de la fonction G permet de distinguer les distributions surfaciques (df_S) des distributions s'apparentant à un dénombrement (df_{\perp}). Toutefois, la question est de savoir laquelle de ces distributions est la plus appropriée pour caractériser des objets et reste indépendante du traitement opéré sur le maillage de l'interface.

Pour représenter les distributions df_G , nous les traçons en fonction de $\hat{\kappa} \times r_0$, avec r_0 le rayon de la sphère de volume équivalent et $\hat{\kappa}$ les classes de courbure. Cela permet de comparer des ellipsoïdes de volume différent et de déterminer leur écart à la sphère de volume équivalent. En

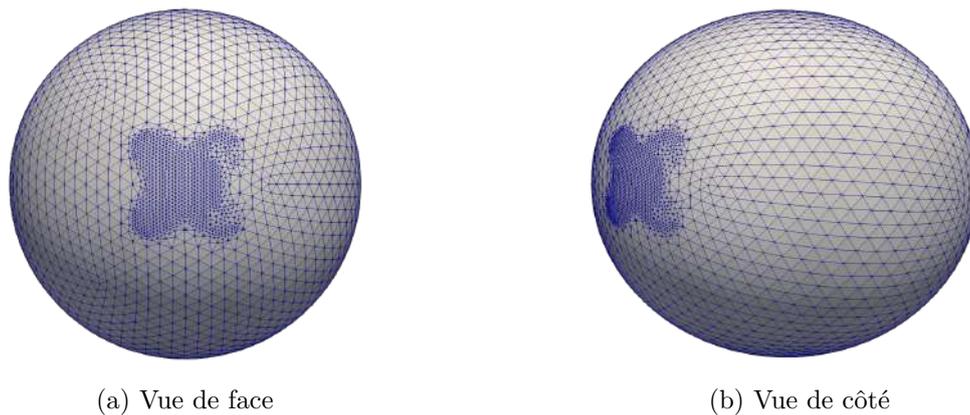


FIGURE 4.10 – Sur-enrichissement de la zone de forte courbure pour un ellipsoïde de paramètre $d_{r_0} = 1/16$, $p = 0\%$ $\alpha = 20\%$

effet, il est à remarquer que $\kappa_{max} \times r_0 = (1 + \alpha)^2$, avec $\kappa_{max} = \hat{\kappa}_{max} + \Delta\kappa/2$. Ce choix a donc l'avantage de déterminer l'étiement α de l'ellipsoïde. Par ailleurs, intégrer df_G sur $\hat{\kappa} \times r_0$ nous donne r_0 et permet ainsi de remonter au volume de l'ellipsoïde.

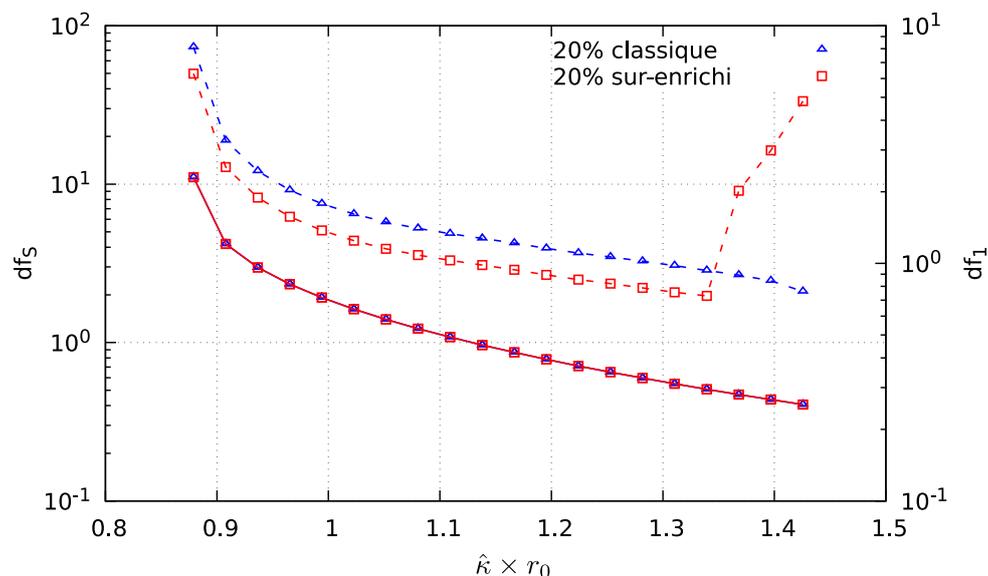


FIGURE 4.11 – Distribution surfacique df_S (trait continu) et distribution de décompte df_{\perp} (trait discontinu) pour deux stratégies de maillage de l'interface sur un ellipsoïde de paramètres $d_{r_0} = 1/16$, $p = 0\%$, $\alpha = 20\%$.

Quant au choix de la distribution, sachant que l'une des distributions se base sur des surfaces élémentaires construites autour des marqueurs de l'interface, et l'autre sur la quantité de marqueurs, un test pour les discriminer doit jouer sur ces facteurs. Le test mis en place consiste préalablement à sur-enrichir une zone quelconque d'une sphère. Cette sphère servira ensuite à générer la famille d'ellipsoïdes d'après la méthode décrite dans la section 4.2.2. La figure 4.10 montre un sur-enrichissement sur la zone de forte courbure pour un ellipsoïde de résolution de courbure $d_{r_0} = 1/16$, de perturbation de maillage $p = 0\%$ et d'étiement $\alpha = 20\%$. Les résultats de ce test sont présentés sur la figure 4.11. La distribution surfacique df_S est en traits continus et la distribution de décompte df_{\perp} en traits discontinus. En bleu sont les résultats obtenus sans la zone de sur-enrichissement et en rouge avec cette zone. Dans les deux cas de figure, les distributions surfaciques df_S sont identiques. Une différence apparaît cependant lorsqu'on compare les distributions de décompte df_{\perp} . En effet, le sur-enrichissement a été effectué dans

une zone de forte courbure. Ainsi, le nombre de marqueurs dans les classes $\hat{\kappa}$ de forte courbure est plus important que lorsqu'il n'y a pas ce sur-enrichissement initial. La distribution df_{\perp} pour les trois dernières classes de courbure $\hat{\kappa} \in \{1.37, 1.40, 1.43\}$ dans le cas du sur-enrichissement est largement supérieure à son équivalent dans le cas "classique" (Fig. 4.11). En contrepartie, pour les autres classes de courbures, la distribution df_{\perp} du cas "sur-enrichi" est en dessous de la distribution du cas "classique".

Ce résultat montre la dépendance de l'allure de la distribution df_{\perp} relativement à la stratégie de gestion du maillage de l'interface. Concernant les autres étirements α , les conclusions restent inchangées. Par conséquent, nous utiliserons par la suite que les distributions surfaciques df_S car contrairement aux distributions df_{\perp} , elles ne sont pas sensibles à la stratégie de gestion du maillage. La distribution df_{\perp} n'est donc pas pertinente pour caractériser des structures.

Calcul d'erreurs

Pour quantifier les erreurs, les courbures moyennes κ_m des marqueurs m utilisées dans les relations (4.10-4.11) sont évaluées grâce aux méthodes de Reconstruction de Surface. Le terme κ_m^{ref} est employé lorsque la courbure est calculé de manière exacte. Quant au terme df_S^{ref} , il désigne la distribution calculée de manière exacte. Les étapes du calcul sont répertoriés dans l'annexe F. Afin de quantifier la précision des méthodes de Reconstruction de Surface sur l'évaluation de κ et de la distribution surfacique df_S , nous calculons les erreurs relatives en norme L_2 et L_{∞} . Deux familles d'erreurs sont introduites :

- les erreurs dites "globales" qui s'intéressent à l'ensemble des classes de courbures $\hat{\kappa}$ et à l'ensemble des courbures κ_m des marqueurs (4.14-4.15). Elles nous informent du comportement des distributions et de l'évaluation des courbures sur l'ensemble du maillage des ellipsoïdes.

$$\text{Err}_2^{\text{rel}}(df_S) = \left[\frac{\sum_{\hat{\kappa} \subset I_{\kappa}} [df_S(\hat{\kappa}) - df_S^{ref}(\hat{\kappa})]^2}{\sum_{\hat{\kappa} \subset I_{\kappa}} (df_S^{ref}(\hat{\kappa}))^2} \right]^{1/2}, \quad \text{Err}_{\infty}^{\text{rel}}(df_S) = \frac{\max_{\hat{\kappa} \subset I_{\kappa}} |df_S(\hat{\kappa}) - df_S^{ref}(\hat{\kappa})|}{\max_{\hat{\kappa} \subset I_{\kappa}} |df_S^{ref}(\hat{\kappa})|} \quad (4.14)$$

$$\text{Err}_2^{\text{rel}}(\kappa) = \left[\frac{\sum_{\kappa_m \in I_{\kappa}} [\kappa_m - \kappa_m^{ref}]^2}{\sum_{\kappa_m \in I_{\kappa}} (\kappa_m^{ref})^2} \right]^{1/2}, \quad \text{Err}_{\infty}^{\text{rel}}(\kappa) = \frac{\max_{\kappa_m \in I_{\kappa}} |\kappa_m - \kappa_m^{ref}|}{\max_{\kappa_m \in I_{\kappa}} |\kappa_m^{ref}|} \quad (4.15)$$

- les erreurs dites "locales". Dans ce cas de figure, l'attention est portée à une classe $\hat{\kappa}$ de courbure donnée et à l'ensemble des courbures κ_m des marqueurs de cette classe (4.16-4.17). Elles nous permettent de voir la précision des méthodes d'évaluation des courbures pour chaque niveau de courbures rencontrés (faibles, intermédiaires, fortes) mais également la précision des distributions surfaciques sur chaque classe $\hat{\kappa}$ de courbure.

$$\text{Err}^{\text{rel}}(df_S)|_{\hat{\kappa}} = \frac{|df_S(\hat{\kappa}) - df_S^{ref}(\hat{\kappa})|}{|df_S^{ref}(\hat{\kappa})|} \quad (4.16)$$

$$\text{Err}_2^{\text{rel}}(\hat{\kappa}) = \left[\frac{\sum_{\kappa_m \in \hat{\kappa}} [\kappa_m - \kappa_m^{ref}]^2}{\sum_{\kappa_m \in \hat{\kappa}} (\kappa_m^{ref})^2} \right]^{1/2}, \quad \text{Err}_{\infty}^{\text{rel}}(\hat{\kappa}) = \frac{\max_{\kappa_m \in \hat{\kappa}} |\kappa_m - \kappa_m^{ref}|}{\max_{\kappa_m \in \hat{\kappa}} |\kappa_m^{ref}|} \quad (4.17)$$

4.2.3 Résultats et analyses

Distribution df_S

Nous rappelons que nous travaillons sur des familles d'ellipsoïdes construites en nous servant des procédures décrites par les relations (4.12) et (4.13). Ainsi pour l'ensemble des données qui seront présentées par la suite, le rayon initial est $r_0 = 1$, la perturbation initiale du maillage est $p = 0\%$ et l'étirement est $\alpha \in \{20\%, 80\%, 140\%\}$. La figure 4.12 présente l'évolution de la distribution surfacique df_S en fonction du paramètre adimensionnel $\hat{\kappa} \times r_0$. La résolution de la courbure est $d_{r_0} = 1/256$.

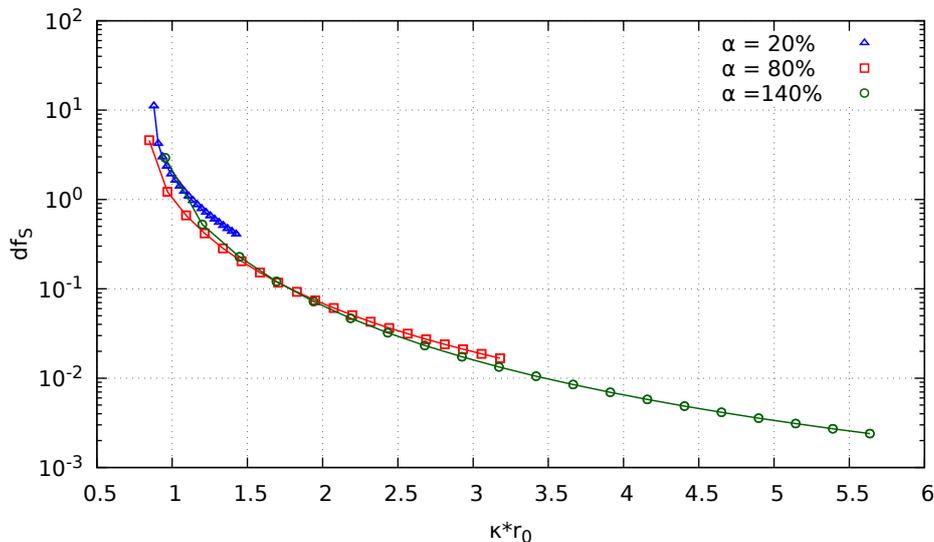


FIGURE 4.12 – Distribution surfacique df_S pour des ellipsoïdes de paramètres $d_{r_0} = 1/256$, $p = 0\%$, $\alpha \in \{20\%, 80\%, 140\%\}$.

Nous pouvons observer que pour un faible étirement $\alpha = 20\%$, la distribution surfacique reste assez compacte, avec une plage de courbure comprise entre 0.9 et 1.5. En effet, pour de faibles étirements (voir fig. 4.7b), l'ellipsoïde reste assez proche de la sphère dont la distribution est un pic à 1. Les courbures dans le plan du demi-petit axe et autour de cette région commencent à diminuer (d'où l'apparition de classes de courbure inférieures à 1) mais restent prédominantes; la fraction de surface qui représente cette classe de courbure est élevée (pour $\hat{\kappa} \times r_0$, $\alpha = 20\%$, $df_S = 10$). En revanche, des courbures de plus en plus importantes sont engendrées sur les extrémités. Toutefois elles restent minoritaires en quantité de surface. Plus on étire la structure ($\alpha \in \{80\%, 140\%\}$), plus la queue de la distribution s'étend vers les fortes courbures, dénotant leur apparition aux extrémités de l'ellipsoïde. En terme de surface, les fortes courbures demeurent minoritaires par rapport aux faibles courbures qui restent autour de la valeur $\hat{\kappa} = 1$.

Maintenant que nous connaissons l'évolution de la distribution surfacique df_S en fonction de l'étirement α de l'ellipsoïde, nous allons nous focaliser sur la précision des méthodes de Reconstruction de Surface SR pour évaluer les courbures et les distributions tout au long du processus de formation des ellipsoïdes. Les méthodes utilisées sont $SR-\mathcal{N}_1-\mathbf{n}_m-a_{00}$, $SR-\mathcal{N}_1-\mathbf{n}_m-0$ (Glimm), $SR-\mathcal{N}_2-\mathbf{n}_m-a_{00}$ et $SR-\mathcal{N}_2-\mathbf{n}_m-0$. Seule la méthode $SR-\mathcal{N}_1-\mathbf{n}_m-0$ (Glimm) est présentée, les conclusions étant les mêmes pour les autres méthodes. Nous nous intéressons dans un premier temps aux erreurs "globales" décrites par les relations (4.14-4.15).

Erreurs "globales"

Pour l'étude de la convergence en maillage des courbures et des distributions surfaciques, nous devons caractériser la finesse de chaque maillage. Pour ce faire, le paramètre $d_{min} \times \kappa_{max}$ est utilisé plutôt que la résolution de la courbure d_{r_0} . En effet, $d_{min} \times \kappa_{max}$ prend en compte l'impact de l'ensemble des procédures de gestion de maillage dans la création des différents ellipsoïdes. Il correspond à la taille minimale des triangles de l'interface ramenée au rayon de courbure le plus petit. Concernant d_{min} , il est obtenu en se servant de la classe de courbure la plus élevée. Elle regroupe les plus fortes courbures rencontrées sur l'ellipsoïde. Connaissant la surface occupée par cette classe de courbure et en supposant que tous les triangles y sont équilatéraux, on en déduit la taille minimale d_{min} . Quant à κ_{max} , elle correspond à la courbure analytique la plus grande sur l'ellipsoïde.

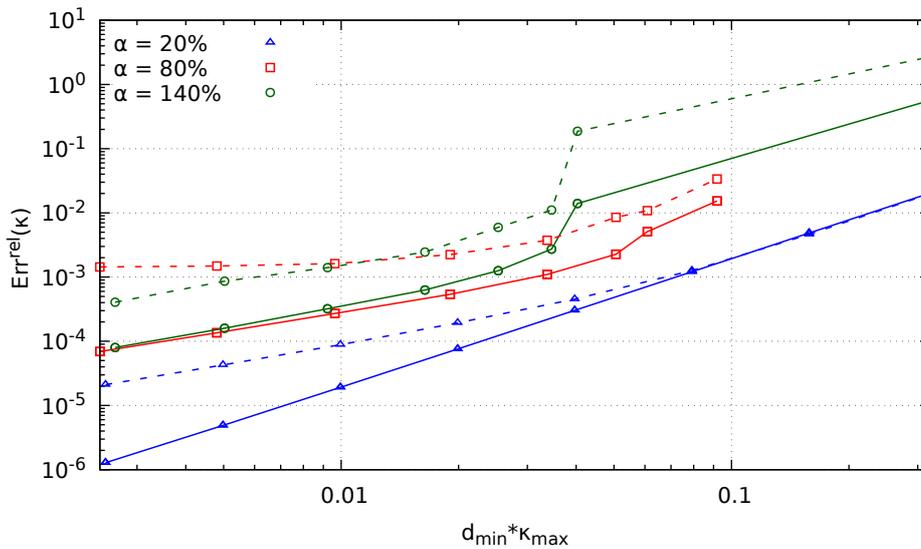


FIGURE 4.13 – Erreurs relatives en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (trait discontinu) sur la courbure κ en fonction de $d_{min} \times \kappa_{max}$ pour des ellipsoïdes de paramètres $p = 0\%$, $\alpha \in \{20\%, 80\%, 140\%\}$.

- Sur la courbure κ : Le premier point sur lequel nous nous concentrons est la convergence de la méthode SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 (Glimm) en fonction du maillage, et ceci pour des ellipsoïdes de différents étirements α . La figure 4.13 présente les erreurs relatives sur la courbure κ en norme L_2 (traits continus) et L_∞ (traits discontinus) en fonction du paramètre $d_{min} * \kappa_{max}$. Pour un faible étirement $\alpha = 20\%$, l'ordre de convergence en norme L_2 est de 2. En effet, l'ellipsoïde avec un étirement $\alpha = 20\%$ reste semblable à une sphère et le maillage initial est ainsi peu perturbé par les procédures de gestion du maillage (Fig. 4.7b). Nous retrouvons l'ordre de convergence pour les méthodes SR dans le cas d'un maillage non perturbé ($p = 0\%$) de la section 3.3.2, page 85. L'augmentation de l'étirement des ellipsoïdes ($\alpha \in \{80\%, 140\%\}$) induit une plus grande fréquence d'application des méthodes de gestion du maillage et par conséquent un impact plus important de la qualité du maillage sur les courbures du maillage (Fig. 4.7c et 4.7d). De cette modification du maillage résulte une baisse de l'ordre de convergence de l'erreur relative sur la courbure : elle converge avec un ordre de 1. Ce résultat est conforme avec les conclusions de convergence des méthodes SR pour une perturbation du maillage $p = 40\%$ (voir Sec. 3.3.2, page 85). Par ailleurs, les courbes pour les ellipsoïdes d'étirement $\alpha \in \{80\%, 140\%\}$ présentent une cassure dans leur allure (à $d_{min} \times \kappa_{max} = 3.5 \times 10^{-2}$ pour $\alpha = 140\%$, et à $d_{min} \times \kappa_{max} = 5.5 \times 10^{-2}$ pour $\alpha = 80\%$). Cet incident peut être corrélé à l'application

des procédures de gestion de maillage. En effet, lorsqu'on analyse l'évolution du nombre de marqueurs sur les ellipsoïdes (Tab. 4.2, page 114), il y a une consistance dans leur évolution pour l'ellipsoïde de paramètre $\alpha = 20\%$; le nombre de marqueurs est multiplié par 4 lorsque la résolution de courbure d_{r_0} est divisée par 2. On retrouve ce facteur 4 pour $\alpha \in \{80\%, 140\%\}$ et les 5 résolutions les plus fines. Ce coefficient baisse cependant sur les résolutions grossières ($1/d_{r_0} \in \{4, 8, 16\}$). Ainsi pour résumer, $\forall d_{r_0}$ et $\alpha = 20\%$, les procédures de gestion du maillage se sont toutes bien enclenchées. Tandis que pour $\alpha \in \{80\%, 140\%\}$, deux phases sont observables. Pour $1/d_{r_0} \in \{4, 8, 16\}$, les critères pour la mise en œuvre des procédures de gestion de maillage n'étaient pas tous satisfaits. Pour $1/d_{r_0} \in \{32, 64, 128, 256, 512\}$, les critères étaient pleinement remplis pour un fonctionnement optimal des procédures. Ce comportement est une explication de la rupture dans l'allure des courbes d'erreurs sur la figure 4.13. On retrouvera cette cassure dans certaines courbes à venir.

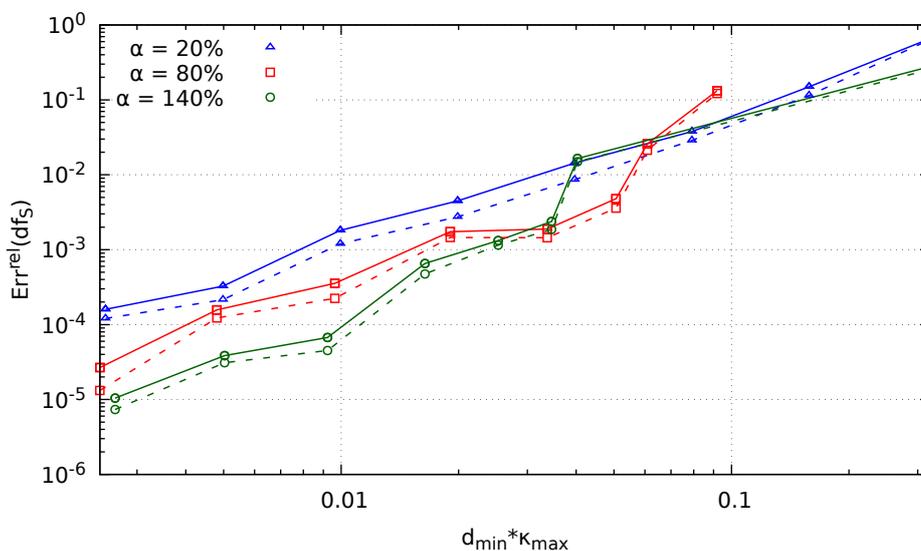


FIGURE 4.14 – Erreurs relatives en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (trait discontinu) sur la distribution df_S en fonction de $d_{min} \times \kappa_{max}$ pour des ellipsoïdes de paramètres $p = 0\%$, $\alpha \in \{20\%, 80\%, 140\%\}$.

- Sur la distribution surfacique df_S : Les erreurs relatives sur la distribution surfacique df_S sont représentées sur la figure 4.14. Quelle que soit l'étirement α de l'ellipsoïde, toutes les erreurs relatives convergent avec un ordre global de 2. Toutefois, ces erreurs diminuent avec l'augmentation de l'étirement, avec respectivement pour $\alpha \in \{20\%, 80\%, 140\%\}$, l'erreur relative $\text{Err}^{rel}(df_S) \in \{10^{-3}, 4 \times 10^{-4}, 8 \times 10^{-5}\}$ en norme L_2 pour $d_{min} \times \kappa_{max} = 10^{-2}$. Une explication de cette baisse de l'erreur avec l'augmentation de l'étirement α est la variation de la taille $\Delta\kappa$ des classes de courbure $\hat{\kappa}$. En effet, le nombre de classe N_c de courbures restant constant, la variation de l'étirement α des ellipsoïdes fait changer les courbures maximale $\max(I_\kappa)$ et minimale $\min(I_\kappa)$ sur ces dernières, avec $\Delta\kappa_{\alpha=20\%} < \Delta\kappa_{\alpha=80\%} < \Delta\kappa_{\alpha=140\%}$. Ainsi, pour un marqueur m de l'interface et pour un même niveau d'erreur commis sur l'évaluation de sa courbure κ_m quel que soit l'étirement α , il est plus susceptible de changer de classe de courbure $\hat{\kappa}$ sur de faibles étirements α que sur des étirements beaucoup plus élevés. Par conséquent, le numérateur des relations (4.14) devient beaucoup plus faible avec l'augmentation de l'étirement des ellipsoïdes. Cette baisse s'observe également au dénominateur de la relation de calcul des erreurs relatives sur la distribution surfacique, mais reste cependant de moins grande ampleur que celle

du numérateur. Nous pouvons voir cette baisse du numérateur avec l'étirement α sur la figure 4.15. Elle représente la contribution de chaque classe $\hat{\kappa}$ de courbure dans le calcul de l'erreur relative, en d'autres termes $[df_S(\hat{\kappa}) - df_S^{ref}(\hat{\kappa})]^2 / \sum_{\hat{\kappa} \in I_{\kappa}} df_S^{ref}(\hat{\kappa})^2 = f(\hat{\kappa})$. Elle permet également de voir que les contributions ont une tendance globale descendante lorsqu'on se déplace des faibles classes de courbures vers les plus fortes. En effet, plus on avance vers les fortes classes de courbures, plus les fractions de surface qu'elles occupent deviennent négligeables. Par conséquent, même s'il pourrait y avoir des variations relatives importantes de surface sur les fortes classes de courbures, les variations absolues sont trop petites pour peser face à celles des faibles classes de courbures. Ainsi, dans le cas de l'ellipsoïde d'étirement $\alpha = 80\%$, la classe de courbure $\hat{\kappa} \times r_0 = 1$ a une contribution de 10^{-11} alors que celle à $\hat{\kappa} \times r_0 = 3.2$ a une contribution de 2×10^{-16} (Fig. 4.15).

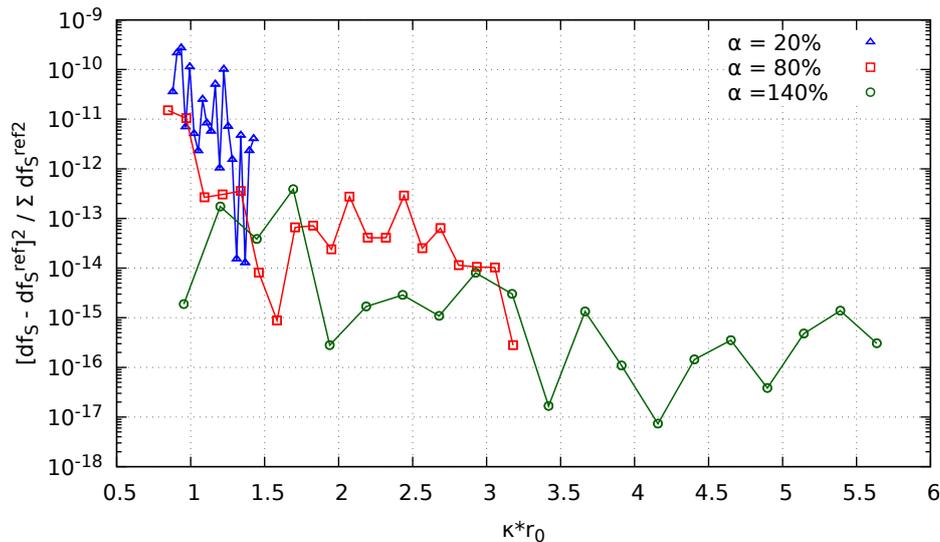


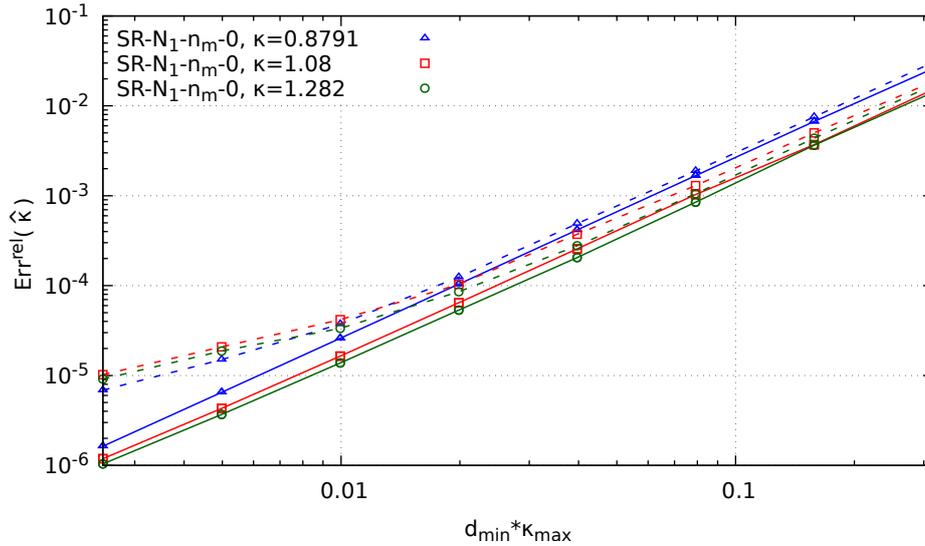
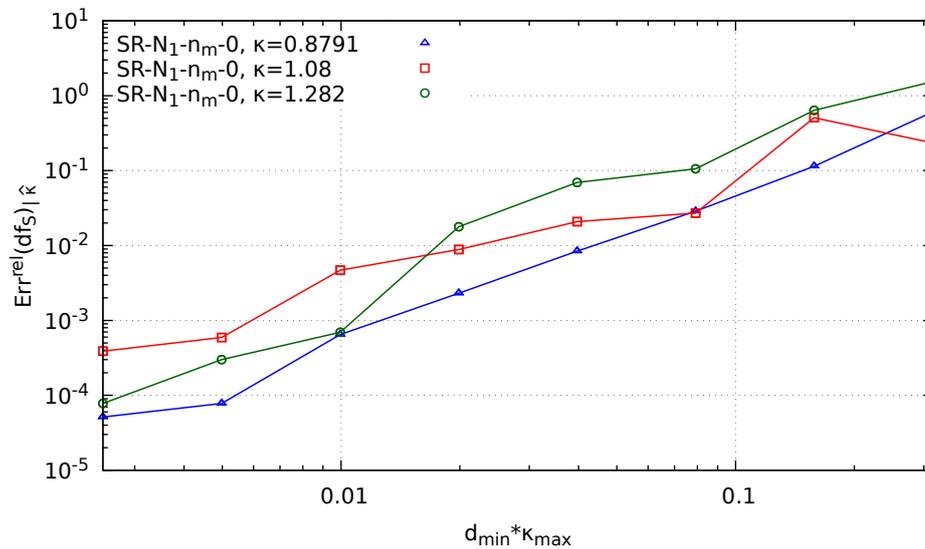
FIGURE 4.15 – Contribution de chaque classe $\hat{\kappa}$ de courbure dans le calcul de $Err^{rel}(df_S)$ pour un ellipsoïde de paramètres $d_{r_0} = 1/256$, $p = 0\%$

L'étude des erreurs relatives sur la courbure κ et sur la distribution surfacique df_S nous montre que nous sommes globalement précis sur l'évaluation de ces deux quantités et que nous pouvons contrôler l'erreur commise lors de leur calcul. Ces résultats, somme toute encourageants, masquent la contribution de chaque classe de courbure, d'où l'idée d'étudier l'évolution des erreurs "locales" présentées dans les relations (4.16) et (4.17).

Erreurs "locales"

L'attention est portée ici sur la précision de la distribution surfacique df_S et également des méthodes d'évaluation des courbures, ceci sur chaque classe $\hat{\kappa}$ de courbure. Les tests ont été menés sur l'ensemble des $N_c = 20$ classes de courbures pour tous les ellipsoïdes. Nous présentons les résultats que sur trois classes de courbures. Ces classes de courbures, pour chaque ellipsoïde d'étirement α sont représentatives des faibles, intermédiaires et fortes classes de courbures rencontrées sur chaque ellipsoïde.

Les erreurs relatives "locales" sur les courbures $Err^{rel}(\hat{\kappa})$ et sur la distribution surfacique $Err^{rel}(df_S)_{|\hat{\kappa}}$ pour un ellipsoïde de paramètre $\alpha = 20\%$ sont présentées sur la figure 4.16. L'ensemble des classes de courbures sélectionnées $\hat{\kappa} \in \{0.8791, 1.08, 1.282\}$ converge à l'ordre 2 (Fig. 4.16a). Nous retrouvons ainsi l'ordre de convergence de 2 illustré dans le cas de l'étude

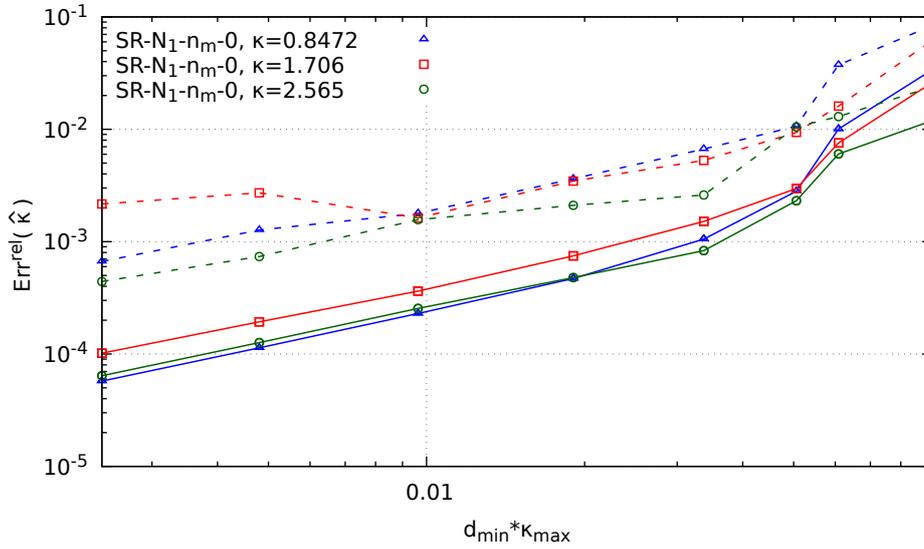
(a) $\text{Err}^{\text{rel}}(\hat{\kappa})$ en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (trait discontinu)(b) $\text{Err}^{\text{rel}}(df_S)|_{\hat{\kappa}}$ FIGURE 4.16 – Erreurs locales sur la courbure κ (4.16a) et sur la distribution surfacique df_S (4.16b) pour un ellipsoïde de paramètre $p = 0\%$, $\alpha = 20\%$.

sur les erreurs globales (Fig. 4.13). Ainsi quel que soit le type de classe de courbure faible, intermédiaire ou forte rencontré sur cet ellipsoïde, les méthodes SR de Reconstruction de Surface ont une bonne évaluation des courbures. Il faut toutefois mentionner que les courbures sont globalement faibles et restent toutes du même ordre, centrées autour de 1.

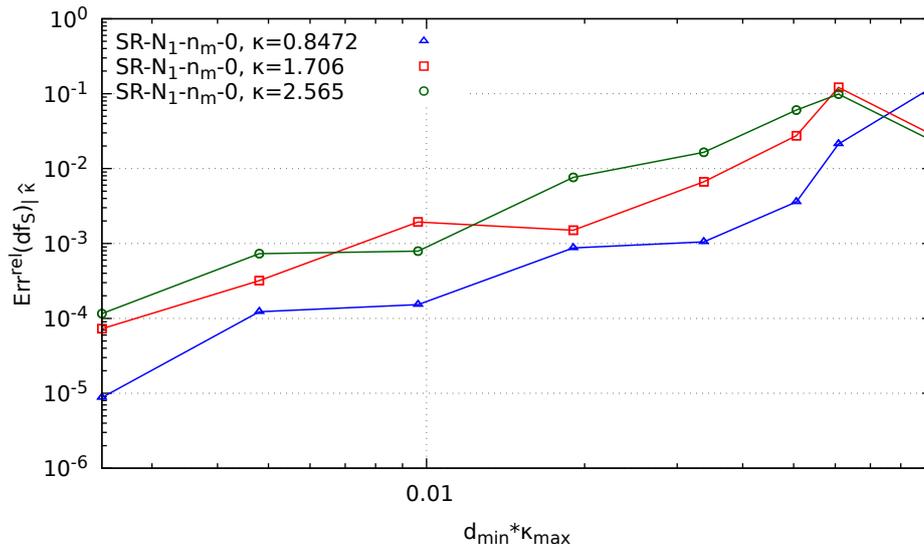
Quant aux erreurs "locales" sur la distribution surfacique df_S (Fig. 4.16b), leurs ordres de convergence de 2 viennent confirmer la tendance observée sur l'erreur globale (Fig. 4.14). Pour $d_{\min} \times \kappa_{\max} > 1.5 \times 10^{-2}$, l'erreur croît lorsqu'on passe des faibles classes de courbures aux fortes classes de courbures. Cependant, lorsque $d_{\min} \times \kappa_{\max} < 1.5 \times 10^{-2}$, une inversion s'opère entre les classes $\hat{\kappa} = 1.08$ et $\hat{\kappa} = 1.282$. Cela peut s'expliquer par un effet dit de "vases communicants". En effet, un marqueur m avec une courbure κ_m mal-évaluée peut basculer ainsi d'une classe de courbure vers une autre classe de courbure adjacente. Cet effet combiné entre toutes les classes de courbures peut ainsi engendrer une augmentation ou une baisse des erreurs locales commises

sur le calcul des distributions surfaciques.

Concernant les ellipsoïdes de paramètre $\alpha \in \{80\%, 140\%\}$, les courbes d'erreurs "locales" sont présentées respectivement sur les figures 4.17 et 4.18. Leur allure est en accord avec les conclusions de la section précédente.



(a) $\text{Err}^{\text{rel}}(\hat{\kappa})$ en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (trait discontinu)

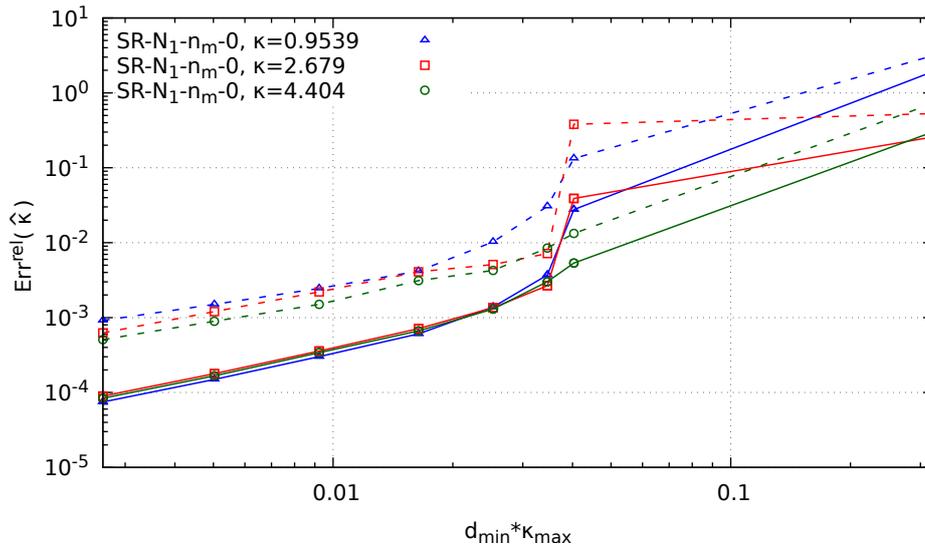
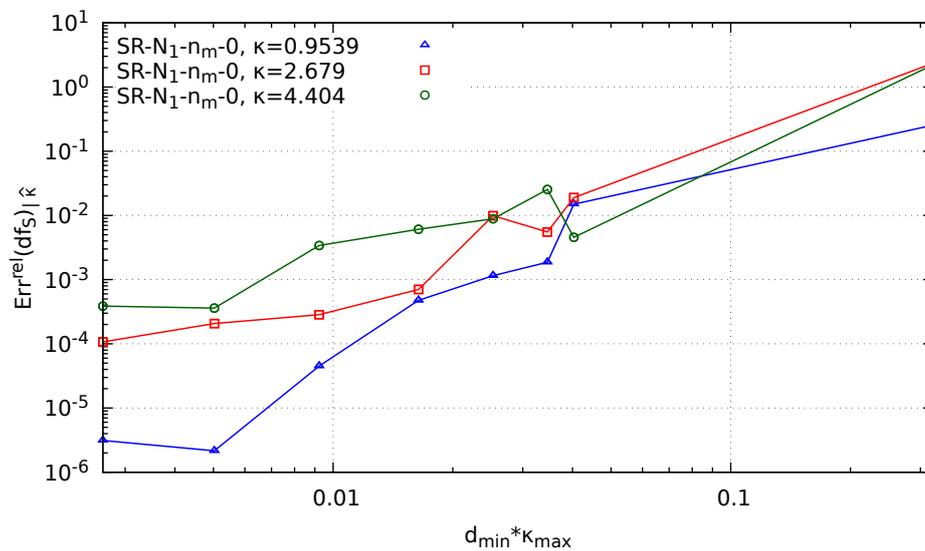


(b) $\text{Err}^{\text{rel}}(df_S)_{\hat{\kappa}}$

FIGURE 4.17 – Erreurs locales sur la courbure κ (4.17a) et sur la distribution surfacique df_S (4.17b) pour un ellipsoïde de paramètre $p = 0\%$, $\alpha = 80\%$.

Conclusion

Deux types de distributions ont été présentées : la distribution de décompte df_{\perp} donnant la fraction de population de marqueurs compris dans une classe de courbure $\hat{\kappa}$, et la distribution df_S qui permet d'avoir la fraction de surface associée à une classe de courbure $\hat{\kappa}$ donnée. Il s'avère cependant que la distribution de décompte df_{\perp} est tributaire de la stratégie de gestion du maillage de l'interface des objets étudiés, alors que la distribution surfacique df_S y est indépendante. Cette dernière est donc la seule appropriée pour caractériser des structures (ici des ellipsoïdes) car,

(a) $\text{Err}^{\text{rel}}(\hat{\kappa})$ en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (trait discontinu)(b) $\text{Err}^{\text{rel}}(df_S)|_{\hat{\kappa}}$ FIGURE 4.18 – Erreurs locales sur la courbure κ (4.18a) et sur la distribution surfacique df_S (4.18b) pour un ellipsoïde de paramètre $p = 0\%$, $\alpha = 140\%$.

en plus d'être indépendante de la stratégie de maillage, elle possède un ordre de convergence global de 2, donnant ainsi un contrôle sur les niveaux d'erreurs en fonction de la finesse du maillage. Par ailleurs, les conclusions sur la précision des méthodes de Reconstruction de Surface sont confortées dans cette partie. Disposant donc d'un outil précis pour la caractérisation de structures, il serait intéressant de se pencher sur des objets beaucoup plus complexes.

4.3 Ellipsoïdes déformées par des fonctions sinueuses et variqueuses

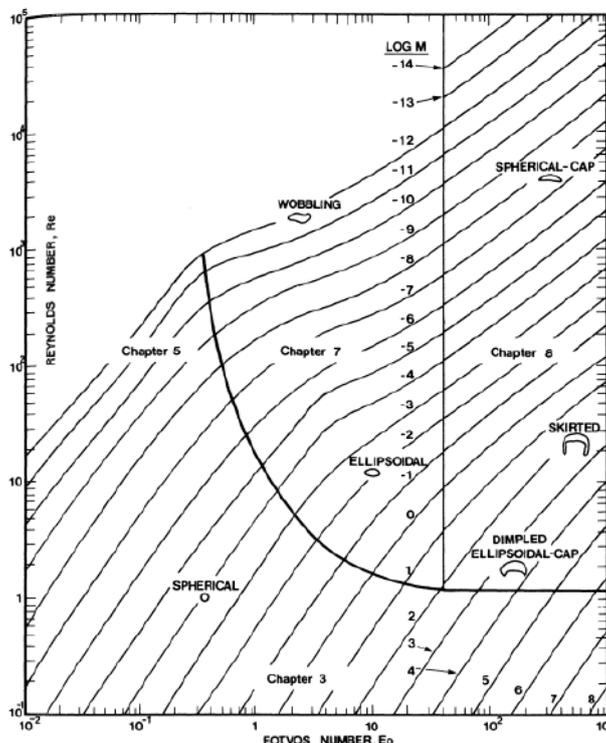


FIGURE 4.19 – Diagramme de Clift [17]

Les structures ligamentaires que l'on peut rencontrer dans un écoulement diphasique ne se limitent pas qu'à des formes simples. En effet, les travaux de CLIFT et al. [17] et BHAGA et al. [9] mettent en lumière la variété de formes prises par des bulles ou gouttes en fonction des nombres de Reynolds Re , Eötvös Eo et Morton Mo dans leur mouvement dans des liquides uniquement sous l'action de la gravité (Fig. 4.19). Dans cette partie, nous nous intéressons plus particulièrement au régime sphérique, ellipsoïdal et wobbling. Ce dernier sera construit en introduisant des perturbations sinueuses et variqueuses de l'interface sur des ellipsoïdes. L'optique est de pouvoir distinguer ces structures variqueuses et sinueuses de leurs équivalents ellipsoïdaux par le truchement de leur distribution surfacique de courbure.

Les déformations sinueuses et variqueuses sont appliquées sur des ellipsoïdes construits selon les relations (4.12) et (4.13). Les paramètres des ellipsoïdes sont $\{p = 0\%, \alpha = 200\%\}$. Soit \bar{x}_m les coordonnées d'un marqueur m de l'interface des ellipsoïdes. Les nouvelles coordonnées \bar{x}_m^{new} des marqueurs m de l'interface pour une déformation sinueuse sont données par la relation (4.18). Quant à la déformation variqueuse, elle est résumée dans la relation (4.19).

$$\bar{x}_m^{new} = \begin{cases} x = a \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ y = b \sin(\theta) \sin(\varphi) + q(x) \quad (\text{sinueux}) \\ z = b \cos(\theta) \end{cases} \quad (4.18)$$

$$\bar{x}_m^{new} = \begin{cases} x = a \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ y = b \sin(\theta) \sin(\varphi)[1 + q(x)] \quad (\text{variqueux}) \\ z = b \cos(\theta)[1 + q(x)] \end{cases} \quad (4.19)$$

avec

$$\forall s \in \mathbb{R}, \quad q(s) = A \sin[2\pi(s - \phi)/\lambda] \quad (4.20)$$

λ est la longueur d'onde de la déformation, A est son amplitude et ϕ le déphasage. Tous ces paramètres sont fonction du demi-grand axe a et du demi-petit axe b . Ainsi soient $\{p_\lambda, p_A, p_\phi\} \subset \mathbb{R}$. Ils caractérisent respectivement l'intensité des paramètres λ , A , ϕ comme indiqué dans la relation (4.21).

$$\lambda = p_\lambda \times a, \quad A = \begin{cases} p_A \times b & (\text{sinueux}) \\ p_A & (\text{variqueux}) \end{cases}, \quad \phi = p_\phi \times \lambda \quad (4.21)$$

Par la suite, pour plus de simplicité, seuls les paramètres $\{p_\lambda, p_A, p_\phi\}$ sont employés pour caractériser les déformations sinueuses/variqueuses. Pour remonter à la longueur d'onde, à l'intensité et au déphasage, on se réfère à la relation (4.21).

Les figures 4.20 à 4.23 illustrent les différentes déformations issues du choix des paramètres $\{p_\lambda, p_A, p_\phi\}$. Les paramètres des déformations prennent les valeurs $p_\lambda \in \{50\%, 100\%, 200\%\}$, $p_A \in \{5\%, 20\%\}$ et $p_\phi \in \{0\%, 25\%\}$. Ainsi $p_\lambda = 100\%$ implique que la périodicité spatiale de la déformation équivaut au demi-grand axe a . Si $p_A = 20\%$, l'amplitude de la déformation vaut 20% du demi-petit axe b dans le cas sinueux. Dans le cas variqueux, c'est 20% de $r(x)$, avec $r(x) = b[1 - x^2/a^2]^{1/2}$. Cela correspond, à x donné, au rayon du cercle compris dans le plan yz . Pour $p_\phi = 25\%$, le déphasage spatial de la déformation est égal à 25% de la longueur d'onde. Pour de grandes longueurs d'onde ($p_\lambda \in \{100\%, 200\%\}$) et de faibles amplitudes de déformations ($p_A = 5\%$), les structures déformées restent assez semblables à des ellipsoïdes (Fig. 4.20b, 4.20c, 4.21b, 4.21c, 4.22b, 4.22c, 4.23b, 4.23c). Dans le cas de faibles amplitudes p_A de déformations, des différences apparaissent lorsque la longueur d'onde p_λ est une fraction du demi-grand axe a ($p_\lambda = 50\%$). Ces différences sont notables avec l'augmentation de l'amplitude p_A de la déformation (Fig. 4.20d, 4.20e, 4.20f, 4.21d, 4.21e, 4.21f, 4.22d, 4.22e, 4.22f, 4.23d, 4.23e, 4.23f).

C'est dans ce cadre que nous choisissons de travailler davantage sur les structures sinueuses/-variqueuses de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%\}$. En effet, elles présentent le plus de disparité avec un ellipsoïde et peuvent être rattachées à des phénomènes physiques comme la perturbation transverse et sinusoidale d'un jet, l'écoulement d'un fluide à forte viscosité ou encore la propagation de perturbations le long d'un jet. Les distributions surfaciques df_S pour le cas sinueux sont premièrement abordées avant de passer à celles de la structure variqueuse.

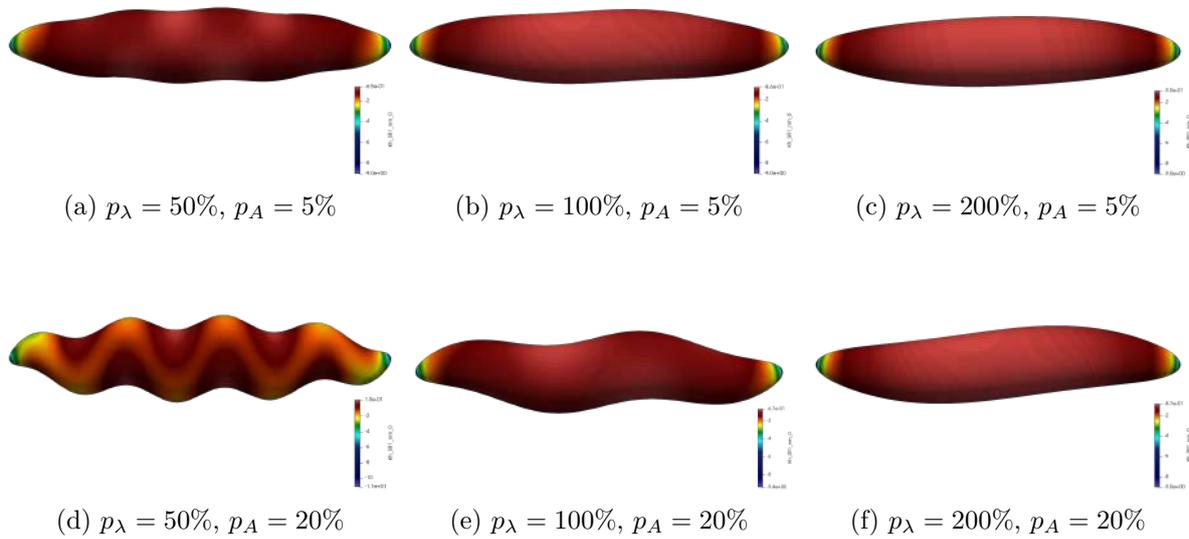


FIGURE 4.20 – Déformations sinueuses ($p_\phi = 0\%$) appliquées à un ellipsoïde de paramètres $\{d_{r_0} = 1/32, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

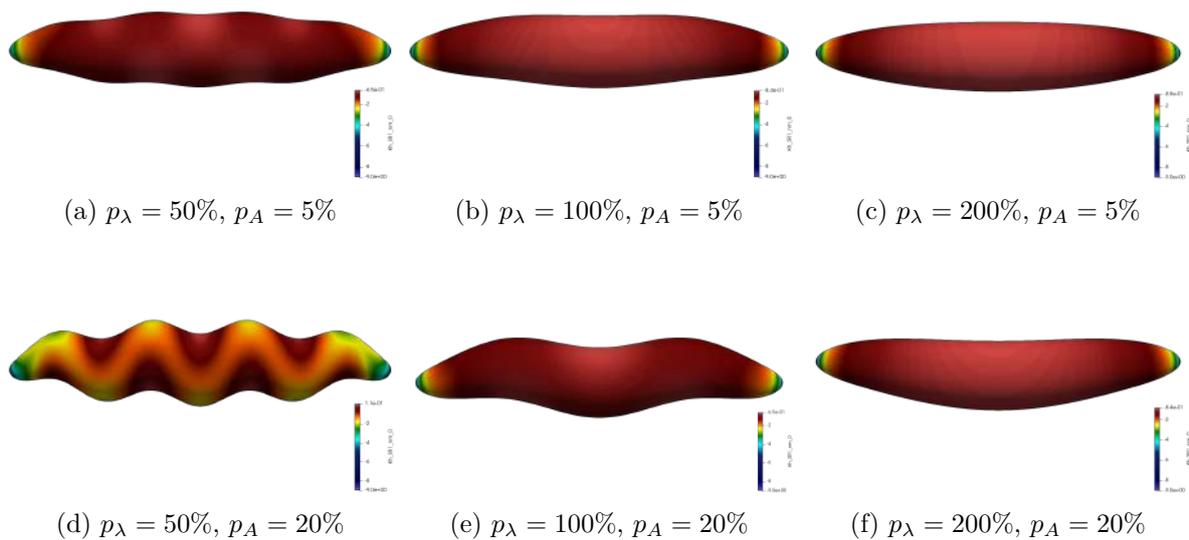


FIGURE 4.21 – Déformation sinueuse ($p_\phi = 25\%$) appliquée à un ellipsoïde de paramètres $\{d_{r_0} = 1/32, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

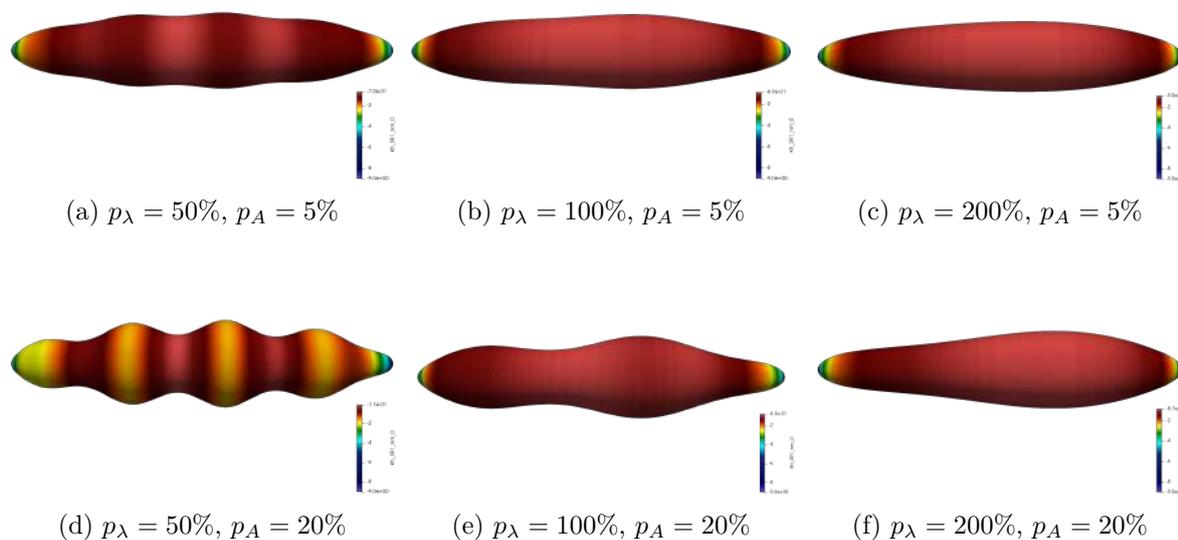


FIGURE 4.22 – Déformation variqueuse ($p_\phi = 0\%$) appliquée à un ellipsoïde de paramètres $\{d_{r_0} = 1/32, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

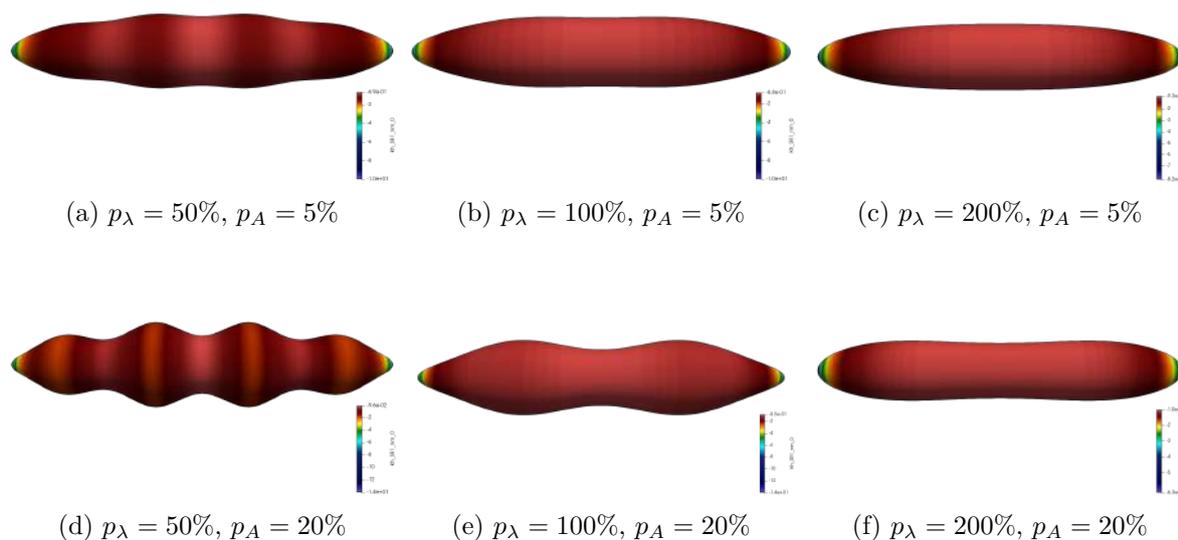


FIGURE 4.23 – Déformation variqueuse ($p_\phi = 25\%$) appliquée à un ellipsoïde de paramètres $\{d_{r_0} = 1/32, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

4.3.1 Déformation sinusoïdale

La déformation sinusoïdale consiste en une translation des plans yz dans la direction y , en fonction de la position x (Fig. 4.20d, 4.21d). Dans un premier temps, la distribution surfacique de ces structures pour $p_\phi = 0\%$ est présentée et analysée. Par la suite, l'effet du déphasage ϕ est discuté.

Distribution surfacique df_S pour $p_\phi = 0\%$

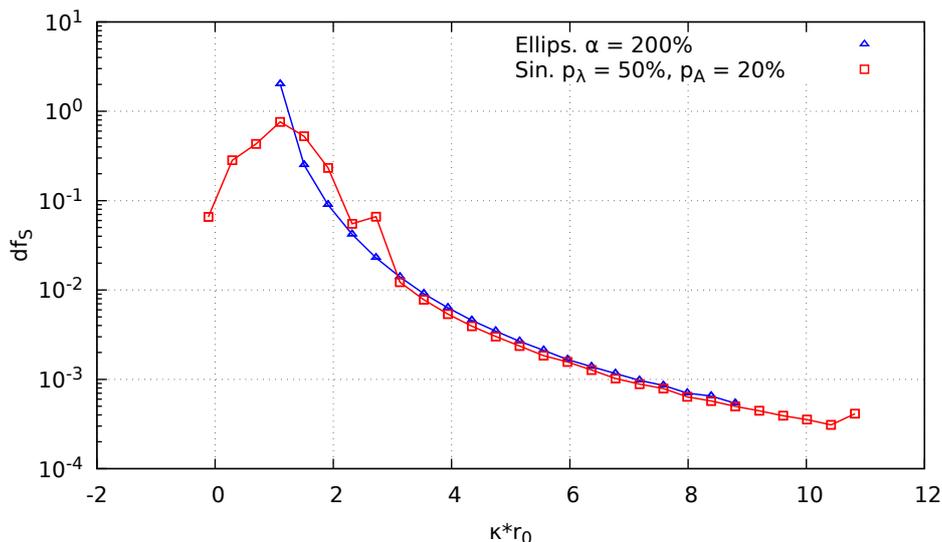


FIGURE 4.24 – Distribution surfacique df_S pour une structure sinusoïdale de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

La distribution surfacique df_S d'une structure sinusoïdale de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$, issue d'un ellipsoïde de paramètre $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$ est illustrée sur la figure 4.24. Elle est représentée en couleur rouge, tandis que la couleur bleue représente la distribution surfacique d'un ellipsoïde de même volume et de même longueur. La distribution surfacique de la structure sinusoïdale présente 3 parties.

- La première zone, pour $\hat{\kappa} \times r_0 \in [-0.1, 3]$ (Fig. 4.24), ressemble à une parabole et regroupe la plus grande fraction de surface de la structure. Le maximum en échelle log est atteint pour $\hat{\kappa} \times r_0 = 1$ avec $df_S(\hat{\kappa}) = 8 \times 10^{-1}$. Elle correspond aux régions où se forment des points selles dus à la déformation sinusoïdale. Des courbures négatives, dues à des courbures principales de signe opposé, commencent également à être générées et leur intensité est fonction de l'amplitude p_A de la déformation. Plus p_A est élevé, plus les courbures dans les vallées et les bosses sont grandes en valeur absolue. Les régions comprises entre ces vallées et ces bosses gagnent également en surface.
- La deuxième zone couvre les classes de courbures $\hat{\kappa} \times r_0 \in [3, 9]$. On retrouve l'allure de la distribution surfacique associée à un ellipsoïde, à savoir une décroissance progressive de la fraction de surface de chaque classe $\hat{\kappa}$ de courbure au fur et à mesure qu'on se déplace vers les fortes courbures. Cette zone, proche des extrémités de la structure sinusoïdale, comprend encore quelques cols induits par la déformation sinusoïdale.

- La dernière zone ($\hat{\kappa} \times r_0 \in [9, 11]$) correspond aux extrémités de la structure sinueuse où la déformation accentue les fortes courbures par rapport à l'ellipsoïde de référence.

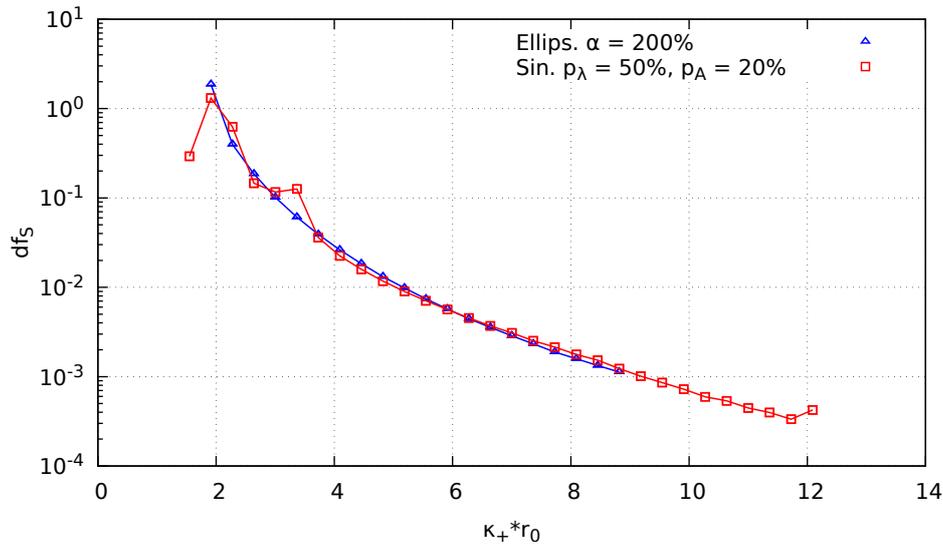
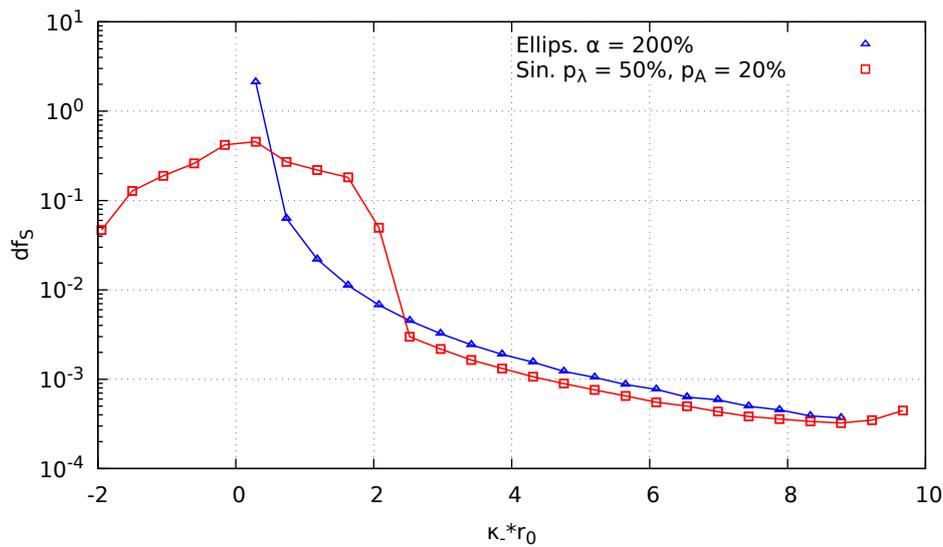
(a) $df_S(\hat{\kappa}_+)$ (b) $df_S(\hat{\kappa}_-)$

FIGURE 4.25 – Distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ pour une structure sinueuse de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

L'ensemble de ces régions de la distribution surfacique de la structure sinueuse permet de la différencier de celle d'un ellipsoïde. Afin de pousser plus loin l'analyse de la distribution surfacique de la structure sinueuse, un regard est porté aux distributions surfaciques associées aux courbures principales. En notant κ_G la courbure de Gauss, les courbures principales s'obtiennent par la relation $\kappa_\pm = \kappa \pm [\kappa^2 - \kappa_G]^{1/2}$. Les courbures principales, notées κ_+ et κ_- sont alors définies par l'équation (4.22).

$$\kappa_+ = \kappa + [\kappa^2 - \kappa_G]^{1/2} \quad , \quad \kappa_- = \kappa - [\kappa^2 - \kappa_G]^{1/2} \quad (4.22)$$

Les distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ qui leur sont associées sont répertoriées en rouge sur la figure 4.25. En bleu, on retrouve les mêmes distributions $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ mais pour un ellipsoïde de référence de paramètres $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

- La distribution $df_S(\hat{\kappa}_+)$ de la structure sinueuse (Fig. 4.25b) est comparable à sa contrepartie ellipsoïdale sur l'intervalle $\hat{\kappa}_+ \times r_0 \in [2, 9]$, malgré un artefact en $\hat{\kappa}_+ \times r_0 = 3.5$. Hormis cet intervalle, elle présente une queue de distribution allongée qui dénote de l'augmentation des fortes courbures à l'extrémité de la structure sinueuse ($\hat{\kappa}_+ \times r_0 \in [9, 12]$). Il y a également la présence de classes de courbures plus faibles, avec $\hat{\kappa}_+ \times r_0 = 1.5$. Il est à noter que toutes les classes $\hat{\kappa}_+$ de courbure sont positives et non-nulles. Cela a pour implication que la structure ne présente pas de surface plane (les deux courbures principales devant être simultanément nulles). Ainsi, les déformations locales de l'intervalle sont pilotés par le signe de la courbure principale κ_- .
- Sur la distribution $df_S(\hat{\kappa}_-)$ (Fig. 4.25b), les classes de courbures $\hat{\kappa}_- \times r_0 \in [-2, 2.5]$ regroupent la plus grande fraction de surface de la structure. La présence de classes de courbures négatives implique que localement des régions de la structure sinueuse sont des points-selles. Sur cette plage de classes de courbures, ce sont celles proches de 0 qui dominent. Par la suite, l'allure de la distribution $df_S(\hat{\kappa}_-)$ est semblable à celle de la référence ellipsoïdale, même si elle demeure légèrement inférieure, sur les classes de courbures $\hat{\kappa}_- \times r_0 \in [2.5, 9]$. Enfin, la queue de la distribution est légèrement allongée, avec l'apparition de plus de classes de fortes courbures sur $\hat{\kappa}_+ \times r_0 \in [9, 10]$.

L'impact de la perturbation sinueuse sur la structure ellipsoïdale de référence peut se résumer en trois parties. La zone 1 concerne les faibles classes de courbures. La distribution surfacique est fortement modifiée et il peut y avoir la création de classes de courbures plus faibles. La zone 2 regroupe les fortes classes de courbures et celles intermédiaires. Sur cette zone, la distribution surfacique de la structure sinueuse reste semblable à celle de l'ellipsoïde, avec peu voire pas de modification. Enfin la zone 3 rend compte de l'impact de la déformation sinueuse sur les fortes courbures de l'ellipsoïde. Distinguer ces zones et rendre compte de l'allure de la distribution surfacique sont des éléments qui permettent de caractériser la structure étudiée.

Influence du déphasage ϕ : cas $p_\phi = 25\%$

La section précédente nous a présenté l'allure des distributions surfaciques de courbure κ et des courbures principales κ_+ et κ_- ($df_S(\hat{\kappa})$, $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$). Nous nous intéressons dans cette partie aux modifications induites sur ces distributions par le déphasage ϕ . La figure 4.26 compare les distributions sus-mentionnées pour des déphasages $p_\phi = 0\%$ (bleu) et $p_\phi = 25\%$ (rouge).

Dans la zone 1 de faibles courbures, les distributions sont identiques. En effet, pour $\hat{\kappa} \times r_0 \in [-0.1, 2.2]$, nous retrouvons la forme "parabolique" (en échelle log) de la distribution $df_S(\hat{\kappa})$ (Fig. 4.26a). Sur la distribution $df_S(\hat{\kappa}_+)$, les pointes sont quasi-identiques sur $\hat{\kappa}_+ \times r_0 \in [1.5, 2.2]$ avec une légère différence sur la fin de cet intervalle (Fig. 4.26b). Quant à la distribution $df_S(\hat{\kappa}_-)$, sur $\hat{\kappa}_- \times r_0 \in [-2, 2.5]$ nous avons la même forme de montagne avec une bosse pour les classes de courbures autour de 0 (Fig. 4.26c). Pour la zone 2 qui, globalement pour l'ensemble des distributions, couvre les classes de courbures sur $[3, 9]$, on observe la décroissance de la fraction de surface avec l'augmentation de la courbure. Les distributions pour le cas $p_\phi = 25\%$ sont supérieures à celles du cas $p_\phi = 0\%$. Elles restent toutefois du même ordre grandeur. Cette différence peut s'expliquer en examinant la zone 3 qui recouvre l'intervalle $[9, 12]$. En effet, la déformation sinueuse avec un déphasage $p_\phi = 25\%$ n'a que peu, voire pas d'impact sur les fortes courbures aux extrémités de l'ellipsoïde. La zone 3 se trouve alors vide, ce qui constitue un gain de surface pour les autres classes de courbures contrairement au cas $p_\phi = 0\%$.

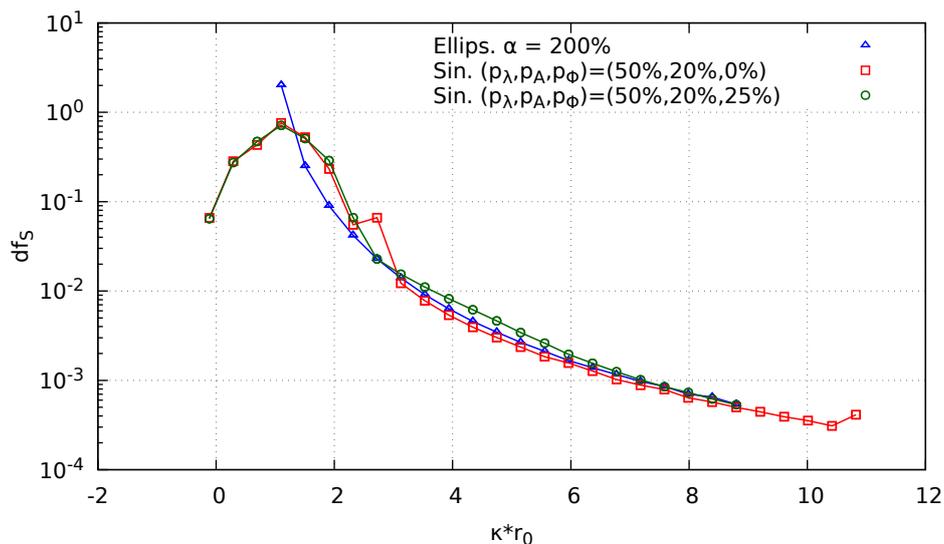
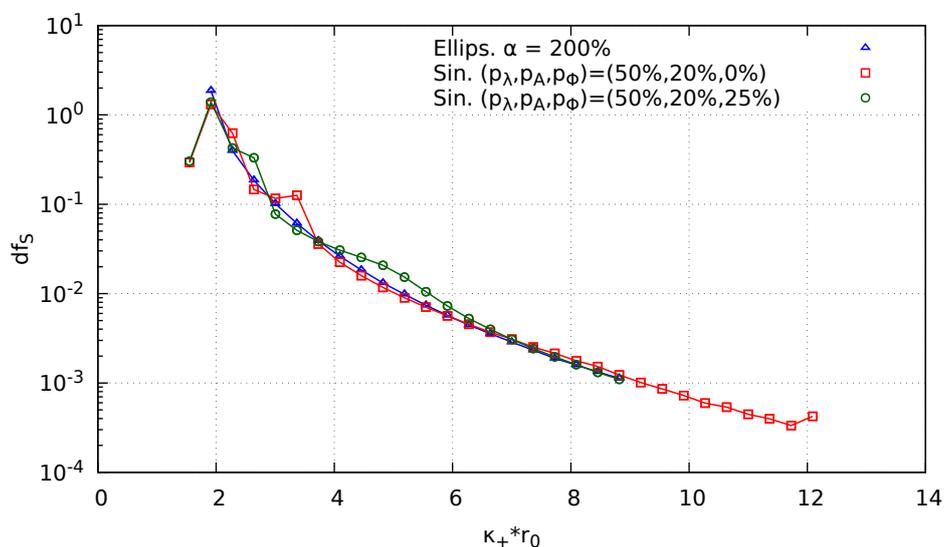
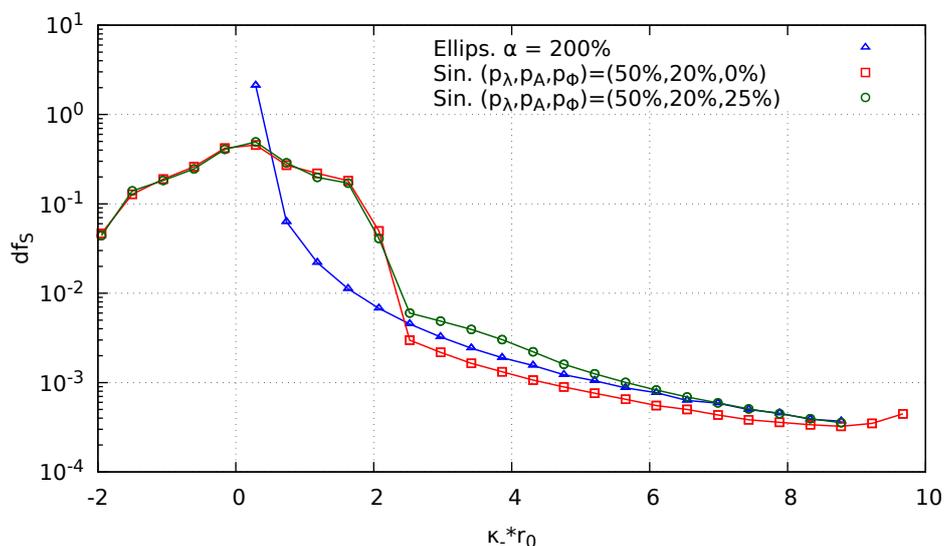
(a) $df_S(\hat{\kappa})$ (b) $df_S(\hat{\kappa}_+)$ (c) $df_S(\hat{\kappa}_-)$

FIGURE 4.26 – Comparaison des distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa})$, $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ pour $p_\phi \in \{0\%, 25\%\}$. La structure sinueuse a pour paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

Conclusion

L'étude de la distribution surfacique de la structure sinueuse nous a conduit à distinguer 3 zones caractéristiques permettant de différencier la structure sinueuse d'un ellipsoïde. Ainsi la zone la plus caractéristique des modifications engendrées par la déformation et qui impacte une majeure partie de la surface de la structure est celle localisée aux niveaux des faibles classes de courbures. Sur la gamme de paramètres employés pour l'étude ($p_\phi \in \{0\%, 25\%\}$), cette zone est peu modifiée et constitue donc un repère important pour décrire la structure.

4.3.2 Déformation variqueuse

Dans cette partie, nous nous intéressons maintenant à la distribution surfacique d'une structure ellipsoïdale perturbée par une déformation variqueuse (4.19). Les paramètres de la déformation sont $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. Une image de la structure variqueuse est répertoriée sur la figure 4.22d.

Distribution surfacique df_S pour $p_\phi = 0\%$

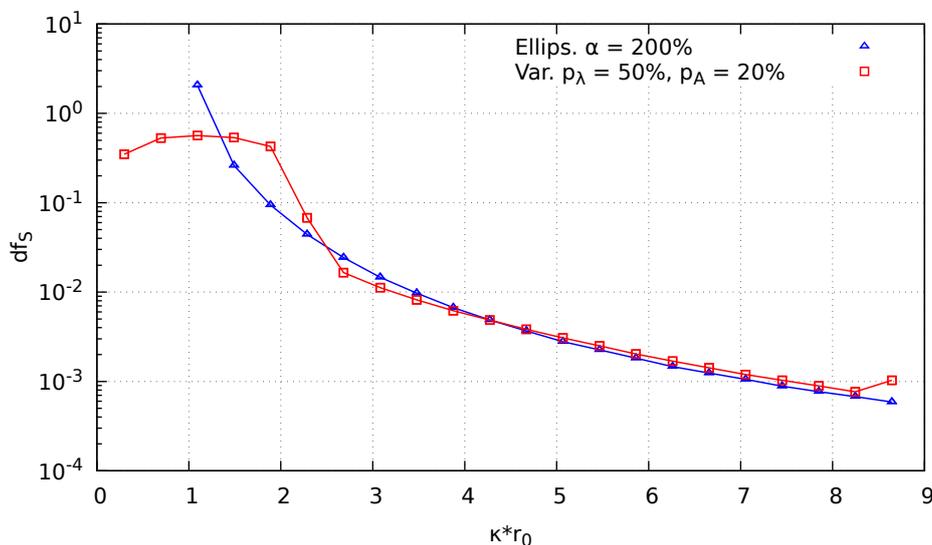


FIGURE 4.27 – Distribution surfacique df_S pour une structure variqueuse de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

La figure 4.27 présente en rouge la distribution surfacique df_S pour une structure variqueuse de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. En bleu, se trouve la distribution d'un ellipsoïde de référence et de paramètres $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$. La distribution surfacique de la structure variqueuse présente 2 parties.

- La première région couvre $\hat{\kappa} \times r_0 \in [0.2, 2.5]$. On distingue d'abord un plateau allant des faibles classes de courbures jusqu'à $\hat{\kappa} \times r_0 = 2$, qui montre une certaine régularité dans la déformation de la structure. Ensuite on observe une chute assez importante de la distribution df_S , passant de 5×10^{-1} à 1.5×10^{-2} sur $\hat{\kappa} \times r_0 \in [2, 2.5]$.
- La deuxième zone est sur l'intervalle $\hat{\kappa} \times r_0 \in [2.5, 8.75]$. La distribution surfacique de la structure variqueuse décroît en se déplaçant vers les fortes courbures, mais légèrement moins lentement que celle associée à l'ellipsoïde.

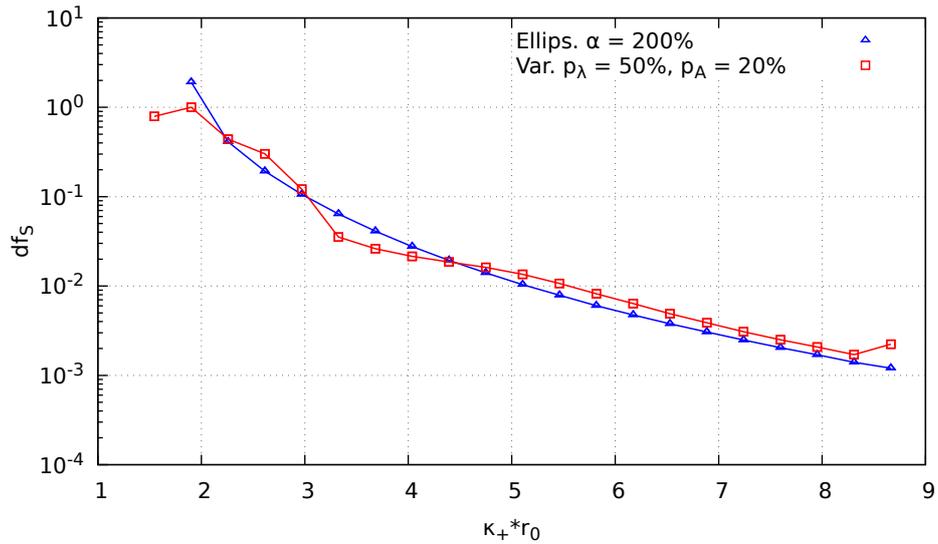
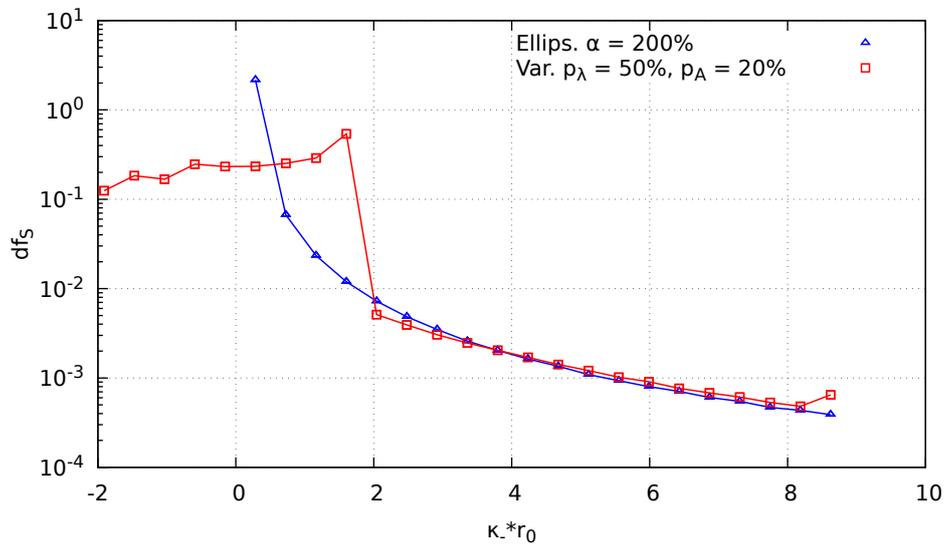
(a) $df_S(\hat{\kappa}_+)$ (b) $df_S(\hat{\kappa}_-)$

FIGURE 4.28 – Distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ pour une structure variqueuse de paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 0\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

En ce qui concerne les distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ sur les courbures principales, elles sont regroupées sur la figure 4.28.

- Pour $\hat{\kappa}_+ \times r_0 \in [1.5, 4.5]$ (Fig. 4.28a), la distribution $df_S(\hat{\kappa}_+)$ oscille autour de celle de l'ellipsoïde. On a l'apparition d'une classe de courbure plus faible comparé au cas ellipsoïdal ($\hat{\kappa}_+ \times r_0 = 1.5$). Sur le reste de l'intervalle $[4.5, 9]$, la distribution $df_S(\hat{\kappa}_+)$ suit la tendance de celle de l'ellipsoïde tout en restant supérieure à cette dernière. Cela est dû aux oscillations observées dans le premier intervalle. Une partie des surfaces a été reportée sur les fortes classes de courbures. Par ailleurs, toutes les classes $\hat{\kappa}_+$ de courbures sont positives, d'où les types de déformations locales seront pilotés par le signe de la courbure principale κ_- .

- Contrairement à la précédente, la distribution $df_S(\hat{\kappa}_-)$ de la structure variqueuse est fortement modifiée sur les faibles classes de courbures, avec la création de classes de courbures négatives (Fig. 4.28b). Ainsi pour $\hat{\kappa}_- \times r_0 \in [-2, 2]$, on observe un plateau légèrement ascendant jusqu'à $\hat{\kappa}_- \times r_0 = 1.7$. Ce plateau traduit encore la régularité des déformations sur la structure variqueuse. A partir de $\hat{\kappa}_- \times r_0 = 1.5$ la distribution $df_S(\hat{\kappa}_-)$ de la structure variqueuse continue sa décroissance en suivant l'allure de celle associée à l'ellipsoïde.

Influence du déphasage ϕ : cas $p_\phi = 25\%$

Comme dans le cas sinueux, l'idée est de voir l'impact sur la distribution de la modification des paramètres de la déformation, et par conséquent d'identifier les zones de la distribution qui sont caractéristiques de la perturbation apportée. Ainsi, la figure 4.29 compare les distributions pour différents déphasages $p_\phi \in \{0\%, 25\%\}$.

Un premier point est l'amplification des classes de fortes courbures avec $p_\phi = 25\%$. Tout un ensemble de classes de courbures apparaissent ainsi sur l'intervalle $[9, 14]$ quelle que soit la distribution considérée. Ces classes supplémentaires par rapport au cas $p_\phi = 0\%$ constituent des surfaces en moins pour les autres classes. Ainsi, sur l'intervalle $[3, 9]$, toutes les distributions du cas $p_\phi = 0\%$ sont supérieures à celles du cas $p_\phi = 25\%$. Seuls sur les intervalles $\hat{\kappa} \times r_0 \in [0, 2]$ pour $df_S(\hat{\kappa})$ (Fig. 4.29a) et $\hat{\kappa} \times r_0 \in [-2, 2]$ pour $df_S(\hat{\kappa}_-)$ (Fig. 4.29c) on retrouve une similarité entre les deux cas $p_\phi \in \{0\%, 25\%\}$. Une légère différence se manifeste sur la distribution $df_S(\hat{\kappa})$ avec l'apparition de classes de courbures négatives à $\hat{\kappa} \times r_0 = -0.1$ (Fig. 4.29a). Cela implique qu'il y a des régions où les courbures principales sont du même ordre mais de signe opposé.

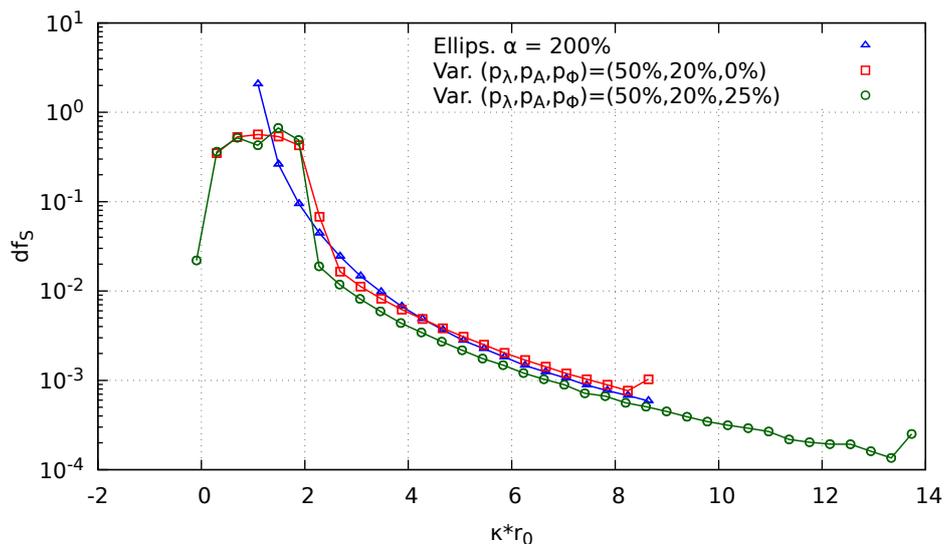
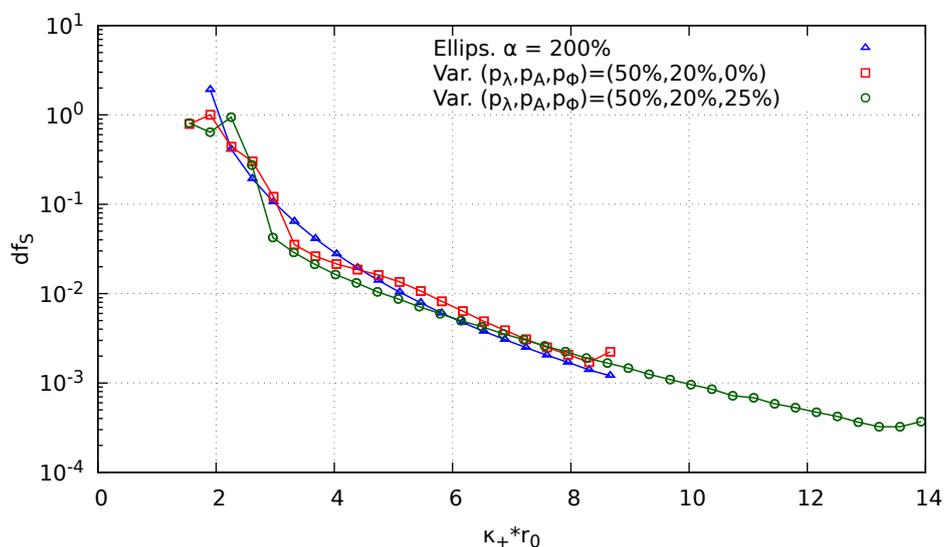
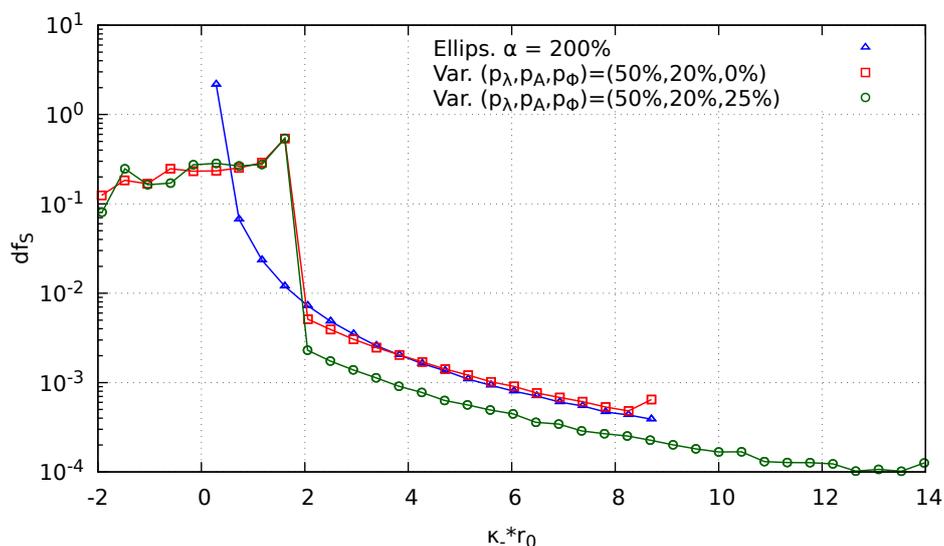
(a) $df_S(\hat{\kappa})$ (b) $df_S(\hat{\kappa}_+)$ (c) $df_S(\hat{\kappa}_-)$

FIGURE 4.29 – Comparaison des distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa})$, $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ pour $p_\phi \in \{0\%, 25\%\}$. La structure variqueuse a pour paramètres $\{\rho_\lambda = 50\%, \rho_A = 20\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

Conclusion

En comparaison au cas sinueux, la déformation variqueuse avec $p_\phi = 0\%$ n'induit que la distinction de 2 zones sur les distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa})$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$, la distribution $df_S(\hat{\kappa}_+)$ se détachant très peu de celle de l'ellipsoïde de référence (Fig. 4.30). Ainsi, la première zone localisée sur les faibles classes de courbures présente une distribution assez plane, dénotant de la régularité de la déformation et de l'alternance entre monts et vallées sur la structure variqueuse. La deuxième zone cumule les classes intermédiaires de courbure et les fortes classes de courbures. Dans cette zone, la distribution suit l'évolution de celle associée à l'ellipsoïde. Il y a une décroissance progressive des fractions de surfaces lorsqu'on avance vers les fortes courbures. Sur les extrémités de la structure, des classes de courbures plus grandes ne sont pas engendrées par la déformation, d'où l'inexistence d'une troisième zone. L'impact du déphasage $p_\phi = 25\%$ est en majeure partie répercuté sur la zone 3, celle des fortes classes de courbures. Ainsi, la structure variqueuse voit ses fortes classes de courbures augmenter tandis que la bulle sinueuse perd complètement cette zone de fortes classes de courbures (Fig. 4.31). La zone 1 des faibles classes de courbures demeure celle présentant le plus d'information pour différencier les bulles sinueuses et variqueuses. Quand à la zone 2 des classes de courbures intermédiaires, même s'il peut y avoir de légères différences par rapport à la référence ellipsoïdale, l'allure des distributions reste du même ordre.

Au vu de ces résultats préliminaires, nous sommes confortés dans notre choix d'utiliser les distributions surfaciques de courbures pour caractériser les interfaces. Pour pousser notre analyse, elles sont évaluées sur des bulles ascensionnelles issues des cas tests 1 et 2 de HYSING et al. [51] en 2D, avec une adaptation 3D par ADELSBERGER et al. [2]. Les configurations des tests sont rappelées brièvement. Le domaine de simulation est une boîte rectangulaire de dimensions $1 \times 2 (\times 2$ en 3D) comprenant une sphère de rayon $r_0 = 0.25$ centrée en $[0.5, 0.5]$ (ou $[0.5, 0.5, 0.5]$ en 3D). Des conditions de no-glissement sont imposées aux parois ($\mathbf{u} = 0$). Les paramètres physiques et adimensionnels des cas tests sont rassemblés dans le tableau 4.3.

Test case	ρ_1	ρ_2	μ_1	μ_2	g	σ	Re	EO
1	1000	100	10	1	0.98	24.5	35	10
2	1000	1	10	0.1	0.98	24.5	35	125

TABLE 4.3 – Paramètres physiques et adimensionnels pour les cas tests de [51].

L'indice 1 est utilisé pour le fluide lourd environnant et l'indice 2 pour la bulle, avec ρ la masse volumique, μ la viscosité dynamique, g la pesanteur, σ le coefficient de tension de surface et :

$$Re = \frac{\rho_1 U_g L}{\mu_1} \quad EO = \frac{\rho_1 U_g^2 L}{\sigma} \quad U_g = \sqrt{gL} \quad L = 2r_0$$

Les figures 4.32 et 4.33 présentent respectivement les bulles du cas test 1 à $t = 3$ et du cas 2 à $t = 1.5$. Elles ont été générées par symétrie axiale à partir des résultats issus des simulations 2D de [51]. D'après le diagramme de Clift (Fig 4.19), la première bulle est de type ellipsoïdale. La deuxième bulle quant à elle se situe entre les régimes "skirted" et "dimpled ellipsoidal-cap". Les distributions surfaciques de courbure $df_S(\hat{\kappa})$ des deux bulles sont présentées sur la figure 4.34. Premier point, elles diffèrent des distributions surfaciques que nous avons obtenues jusqu'à présent. Concernant la distribution df_S du cas test 1 (couleur bleue sur Fig. 4.34), nous avons une prédominance des classes de faibles courbures qui correspondent à la calotte et la base aplatie de la bulle. Lorsqu'on se déplace vers les fortes classes de courbures, la décroissance de leur distribution s'accélère. Les fortes classes de courbures ont une fraction de surface minoritaire

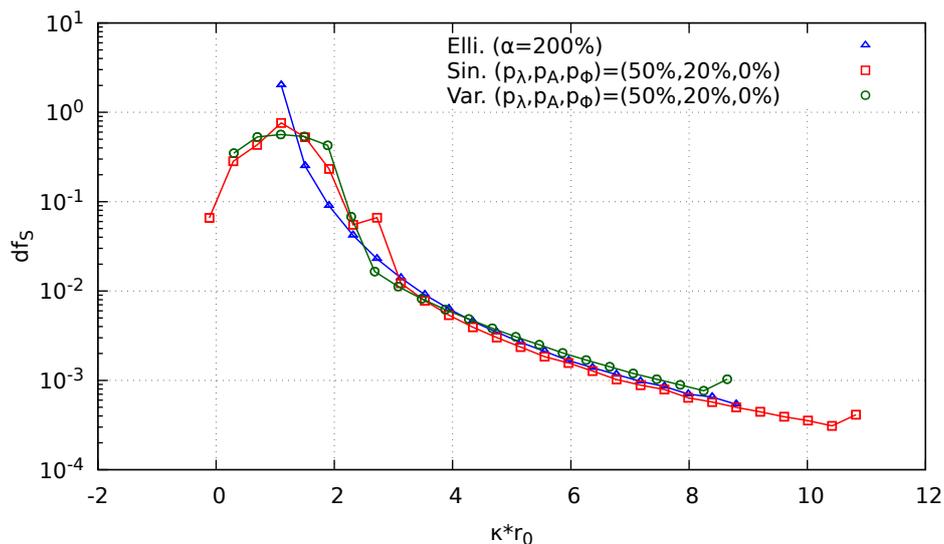
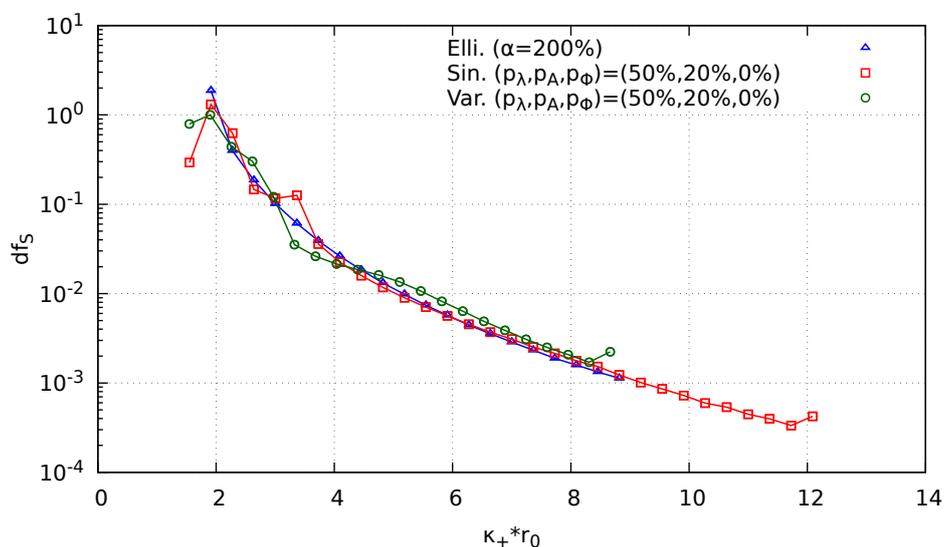
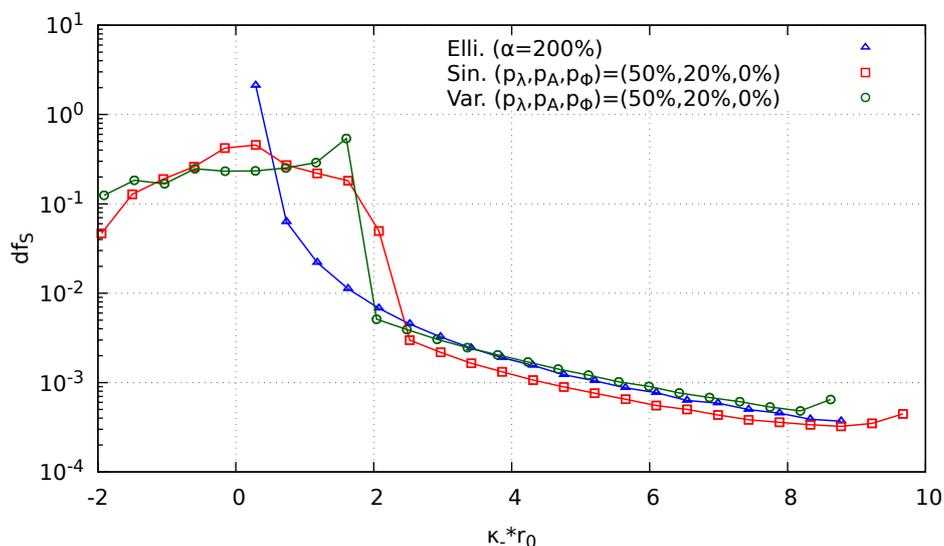
(a) $df_S(\hat{\kappa})$ (b) $df_S(\hat{\kappa}_+)$ (c) $df_S(\hat{\kappa}_-)$

FIGURE 4.30 – Comparaison des distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa})$, $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ entre les structures sinueuse et variqueuse avec pour paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\Phi = 0\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

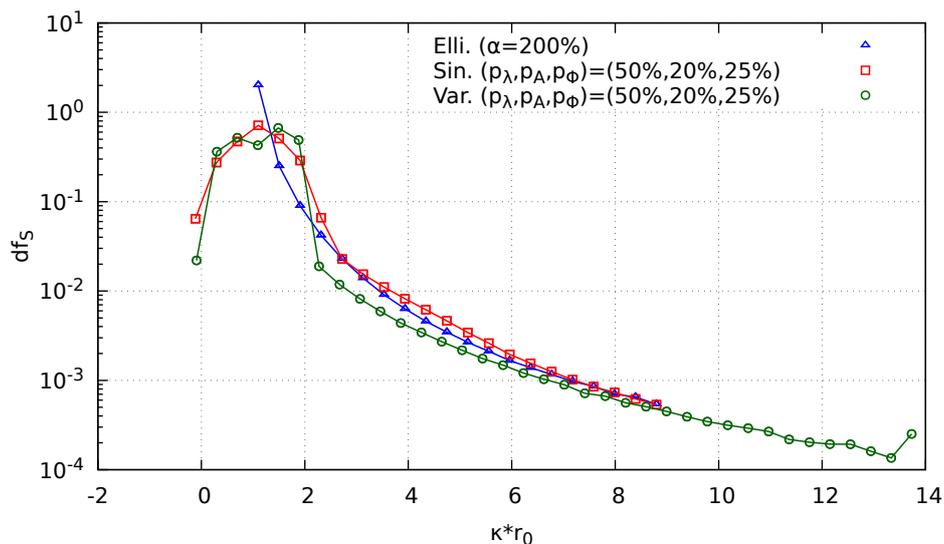
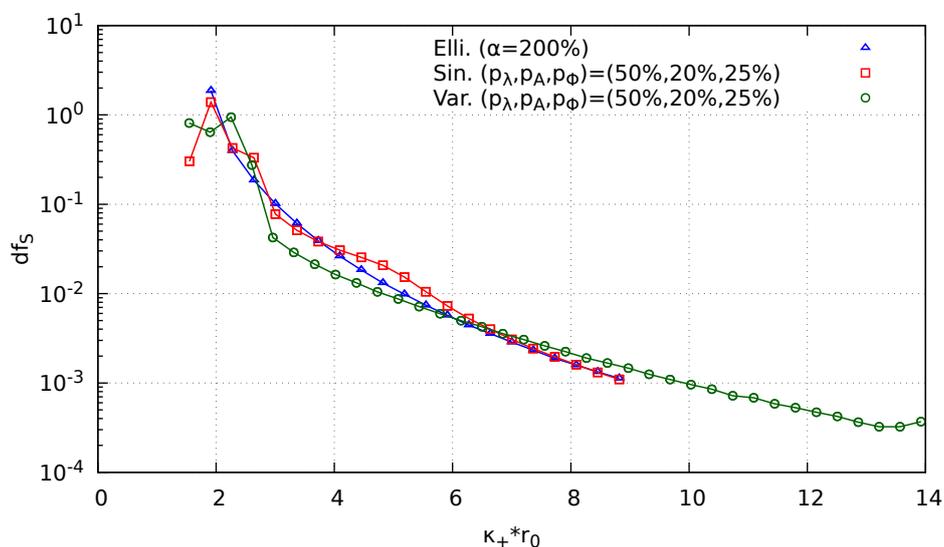
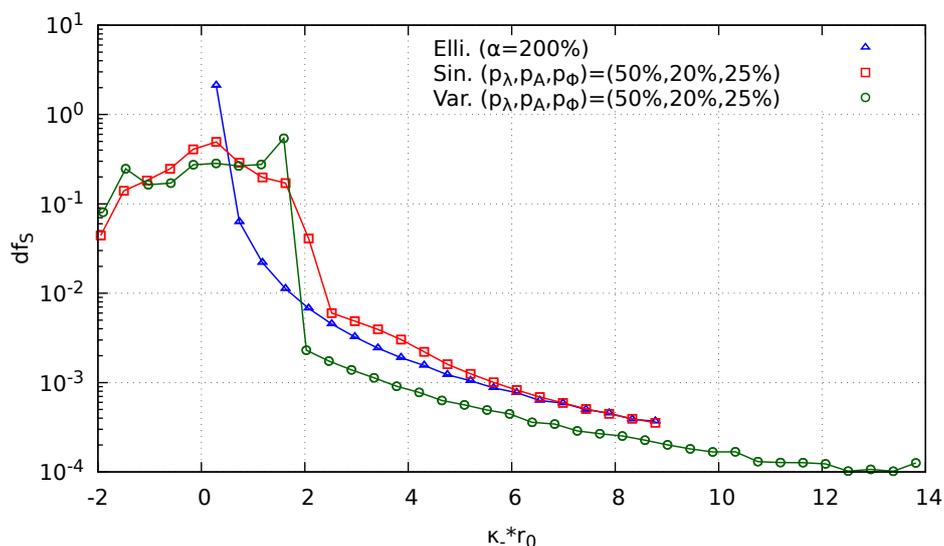
(a) $df_S(\hat{\kappa})$ (b) $df_S(\hat{\kappa}_+)$ (c) $df_S(\hat{\kappa}_-)$

FIGURE 4.31 – Comparaison des distributions surfaciques $df_S(\hat{\kappa})$, $df_S(\hat{\kappa}_+)$ et $df_S(\hat{\kappa}_-)$ entre les structures sinueuse et variqueuse avec pour paramètres $\{p_\lambda = 50\%, p_A = 20\%, p_\phi = 25\%\}$. L'ellipsoïde de départ est définie par $\{d_{r_0} = 1/256, p = 0\%, \alpha = 200\%\}$.

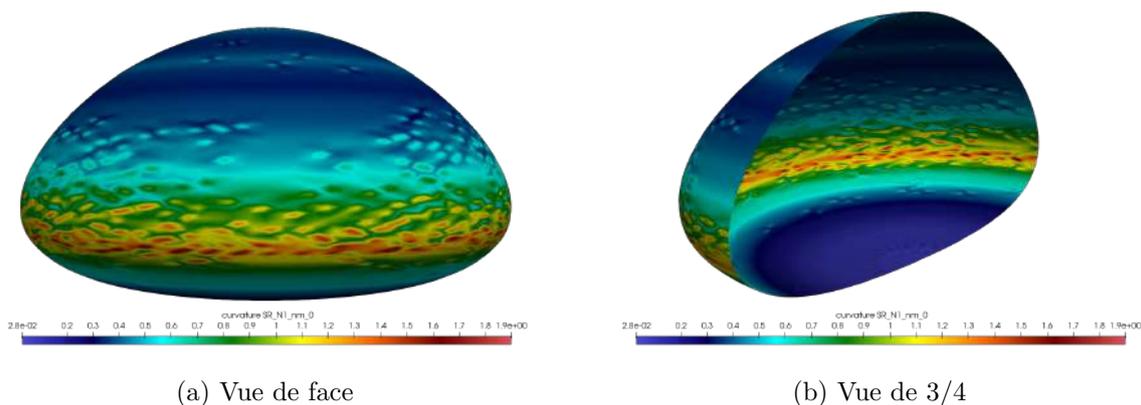
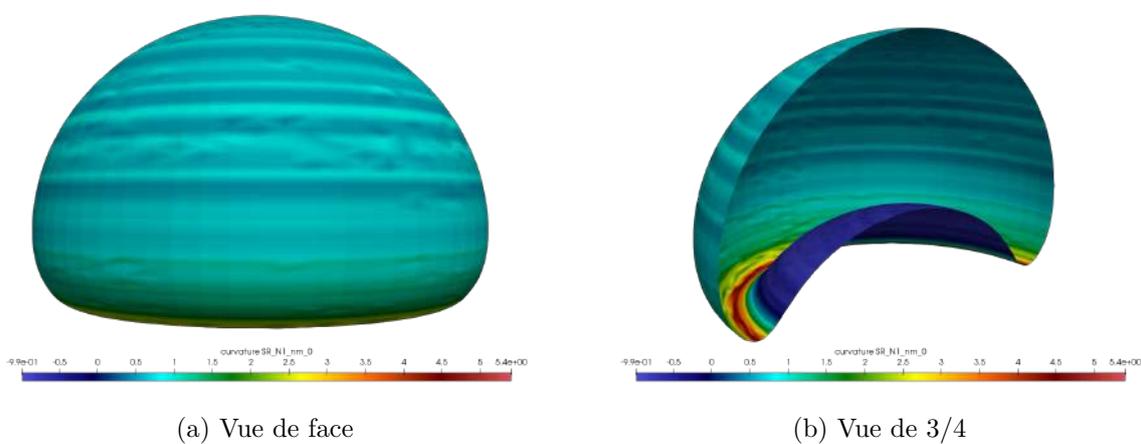
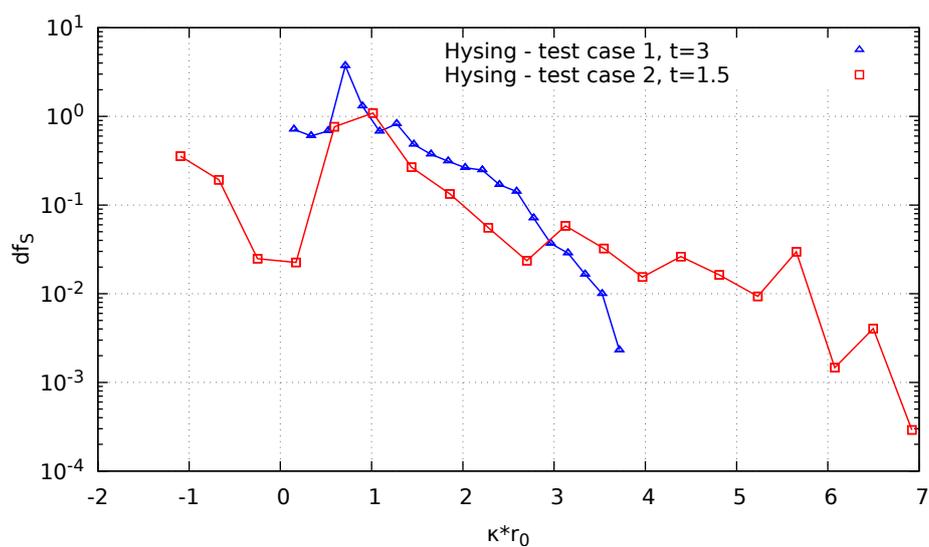
FIGURE 4.32 – Bulle 3D issue du cas test 1, à $t = 3$ [2, 51]FIGURE 4.33 – Bulle 3D issue du cas test 2, à $t = 1.5$ [2, 51]

FIGURE 4.34 – Distributions surfaciques de bulles issues des cas tests 1 et 2 de [51].

et sont localisés au niveau du renflement de la bulle. La distribution df_S du cas test 2 (couleur rouge sur Fig. 4.34) est beaucoup plus étendue en terme de classes de courbures $\hat{\kappa}$. Les classes

dominantes en terme de surface sont centrées autour des valeurs $\hat{\kappa} = -1$ et $\hat{\kappa} = 1$. La bulle présente donc des régions convexes et concaves en proportion égale. Le passage entre ces deux régions nécessite l'annulation de la courbure d'où la présence de classes de courbures centrées autour de $\hat{\kappa} = 0$. Elles constituent la deuxième force en terme d'occupation de surface, place qu'elles partagent avec les courbures intermédiaires. Les fortes classes de courbures ferment naturellement le podium.

Ces tests opérés sur différentes structures ont montré la diversité des distributions surfaciques. C'est un premier pas dans l'élaboration d'une base de données pour caractériser et identifier les formes de bulles/gouttes dans des écoulements diphasiques.

Bibliographie

Identification d'objets grâce à leurs propriétés surfaciques

- [2] J. ADELSBERGER, S. GROSS, M. KLITZ, A. RÜTTGERS et M. GRIEBEL. “3D Incompressible two-phase flow benchmark computations for rising droplets”. In : *11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI), 5th European Conference on Computational Mechanics (ECCM V), 6th European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD VI)*. Sous la dir. d'E. ÖNATE, J. OLIVER et A. HUERTA. 2013 (cf. p. 138, 141).
- [9] D. BHAGA et M. E. WEBER. “Bubbles in viscous liquids : shapes, wakes and velocities”. In : *J. Fluid Mech.* 105 (1981), p. 61-85 (cf. p. 126).
- [17] R. CLIFT, J. R. GRACE et M. E. WEBER. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, 1978 (cf. p. 126, 146).
- [26] J. DU, B. FIX, J. GLIMM, X. JIA, X. LI, Y. LI et L. WU. “A simple package for front tracking”. In : *J. Comput. Phys.* 213 (2006), p. 613-628 (cf. p. 29, 33, 73, 78, 79, 83, 85, 90, 92, 107, 161, 163).
- [51] S. HYSING, S. TUREK, D. KUZMIN, N. PAROLINI, E. BURMAN, S. GANESAN et L. TOBISKA. “Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 60.11 (2009), p. 1259-1288 (cf. p. 138, 141, 146).
- [76] M. MEYER, M. DESBRUN, P. SCHRODER et A. H. BARR. “Discrete Differential-Geometry Operators for Triangulated 2-Manifolds”. In : *Visualization and Mathematics III*. Sous la dir. de H.-C. HEGE et K. POLTHIER. Springer, 2003, p. 35-57 (cf. p. 33, 36, 75, 76, 81, 85, 90, 92, 107, 152, 154).
- [123] G. TRYGGVASON, R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI. *Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows*. 1^{re} éd. Cambridge University Press, 2011 (cf. p. 31, 77, 82, 85, 90, 93, 95, 107).

Chapitre 5

Conclusion générale et perspectives

Ce travail a eu pour objectif de développer des outils afin de caractériser les interfaces présentes au sein d'écoulements diphasiques à phases séparées, au travers de leurs courbures et normales. Outre la bonne évaluation des forces de tension de surfaces, caractériser les interfaces diphasiques lors de leur complexe évolution topologique peut permettre de remonter à des propriétés physiques de l'écoulement.

Ainsi, un des premiers éléments fut la détermination de la stratégie pour décrire les changements de l'interface. Le choix s'est porté sur la méthode du front-tracking. Elle a l'avantage de donner explicitement la position de l'interface et d'accéder aisément aux propriétés de la surface. Afin de suivre correctement tous les changements topologiques de l'interface, nous avons entièrement implémenté dans le code maison FUGU développé au sein de l'équipe TCM de MSME un ensemble de procédures de gestion de maillage. Elles sont réparties en deux groupes. Le premier vise à garder un maillage de l'interface adéquat grâce aux procédures d'enrichissement et de désenrichissement. Le second vise l'amélioration de la qualité du maillage pour avoir des triangles les plus équilatéraux possibles. Il regroupe les procédures de lissage, d'échanges d'arêtes et de suppression de triangles de très mauvaise qualité. Nous avons également mis en place une procédure permettant le contrôle du volume en usant des normales aux marqueurs de l'interface et de leurs vitesses. D'un point de vue qualitatif, nos procédures fournissent d'excellents résultats vis à vis du test proposé par LEVEQUE [65] et repris par ENRIGHT et al. [30], qui consiste à déformer une sphère dans un champ tourbillonnaire. Qualitativement, nous avons aussi de bons résultats car nous observons une convergence d'ordre 2 avec le maillage de l'erreur spatiale entre la sphère déformée et une de référence.

Le second volet de notre travail a concerné les méthodes utilisées dans le cadre du front-tracking pour évaluer les courbures et les normales aux marqueurs de l'interface. Ce travail a fait l'objet d'un article accepté dans *Journal of Computational Physics*. Trois familles de méthodes ont été comparées entre elles. La première se base sur la discrétisation de l'opérateur de Laplace-Beltrami (LBO). La deuxième s'appuie sur la formulation intégrale de la force de tension de surface (IF). Et la dernière correspond aux méthodes de reconstruction de surface (SR). Deux tests ont été menés. Le premier test dit statique est effectué sur une surface présentant une large variété de courbures, donnant lieu localement à la présence de surfaces de type parabolique, point-selle et cylindrique. Le second test dit dynamique est un test original qui prend en compte les schémas de transport lagrangien des marqueurs de l'interface. L'évolution de la surface à chaque instant est connue analytiquement et ses propriétés géométriques sont déduites aisément. Ce dernier test offre également la possibilité, selon le choix d'un paramètre, de se trouver dans des situations où nous avons soit une évolution "smooth" de la surface avec une variation brusque et localisée de la courbure (cas de l'impact d'une goutte), soit le développement d'un pincement (cas après la rupture d'une goutte). Dans le cas statique avec une surface perturbée ou pas, les méthodes SR s'avèrent les plus précises avec un ordre 2 de convergence en maillage pour l'option sans perturbation $p = 0\%$ et un ordre 1 lorsque $p = 20\%$. Elles fournissent également le meilleur

rapport erreur relative/temps CPU. Dans le cas dynamique, pendant que les méthodes LBO et IF peinent, voire ne convergent pas, les méthodes SR sont les seules à converger avec un ordre proche de 1. Elles ont donc été sélectionnées dans notre étude pour la dernière partie de notre travail.

Ce dernier volet a été consacré à l'introduction de la distribution surfacique df_S , à son étude et la caractérisation de différentes interfaces rencontrées dans des écoulements diphasiques (cas des bulles/gouttes de type sphérique, ellipsoïdale, wobbling [17]). Contrairement à son pendant df_{\perp} orienté sur le dénombrement, elle est indépendante de la stratégie de gestion de maillage employée par l'utilisateur. Indépendante d'une discrétisation raisonnable de la plage de courbures (ou par rapport au nombre de classes de courbure $\hat{\kappa}$), elle peut s'évaluer analytiquement sur des ellipsoïdes. Elle y converge à l'ordre 2 sur chaque classe de courbure $\hat{\kappa}$ et aussi globalement avec le raffinement du maillage de l'interface. Pour une sphère, elle présente un pic localisé à la courbure de celle-ci. Pour des ellipsoïdes, elle a une allure en " $1/x$ ", qui est d'autant plus étirée vers les fortes classes de courbures que l'ellipsoïde est allongé. Dans le cas de bulles de type wobbling, nous avons étudié deux types de déformation (sinueux et variqueux) dont les paramètres sont la longueur d'onde, l'amplitude et le déphasage de la perturbation. Ainsi pour de grandes longueurs d'onde et une faible amplitude, aucune démarcation n'a été repérée entre les distributions surfaciques de courbures des bulles déformées et leur contrepartie ellipsoïdale de volume et d'étirement identiques. Des différences apparaissent pour de petites longueurs d'onde et une grande amplitude de déformation. Trois parties se distinguent alors. La première zone, qui regroupe les petites classes de courbures, présente une forme "parabolique" dans le cas sinueux et un plateau dans le cas variqueux. Ces formes se retrouvent également en se penchant sur les distributions surfaciques des courbures principales, notamment la distribution $df_S(\hat{\kappa}_-)$. La seconde partie couvre les classes de courbures intermédiaires, avec des distributions qui ont du même ordre que ce qu'on observe sur les références ellipsoïdales. Quant à la troisième partie, elle concerne les fortes courbures. Elle est plus ou moins présente et prononcée en fonction du déphasage de la déformation. Entre les cas sinueux et variqueux, les différences les plus notables se situent sur les zones 1 et 3 des distributions, à savoir sur les petites classes de courbures et sur les plus grandes. Ces distinctions nous permettent d'identifier les deux cas de figure. Pour aller plus loin, les distributions de bulles issues des cas tests de HYSING et al. [51] ont aussi été effectuées et présentent des allures uniques et différentes de objets précédemment étudiés.

Ce travail se veut une étape préliminaire dans l'identification automatique d'interfaces. Au vu des études menées, une première perspective est l'expansion de l'étude paramétrique sur structures wobbling en prenant une gamme beaucoup plus étendue pour les paramètres que sont la longueur d'onde, l'amplitude et le déphasage de la déformation. Il serait intéressant de voir comment les distributions que nous avons obtenues et présentées jusqu'à maintenant évoluent avec ces paramètres. Par la suite, le périmètre des analyses peut être étendu, dans un premier temps, aux autres formes rencontrées dans le diagramme de Clift [17], puis à des formes plus générales en utilisant les harmoniques sphériques. Sur ce dernier point, nous avons déjà entamé un travail sur les calculs analytiques impliquant les harmoniques sphériques et la génération de structures à partir d'elles [24, 25, 71, 72, 97, 101, 105, 133, 134]. Tous ces résultats constitueront une base de données, qui servira de socle pour la mise en place d'un système d'apprentissage.

Bibliographie

Conclusion générale et perspectives

- [17] R. CLIFT, J. R. GRACE et M. E. WEBER. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, 1978 (cf. p. 126, 146).
- [24] S.-H. DONG. “Comment on ‘A single-sum expression for the overlap integral of two associated Legendre polynomials’”. In : *J. Phys. A : Math. Gen.* 35 (2002), p. 4187-4188 (cf. p. 146).
- [25] S.-H. DONG et R. LEMUS. “The Overlap Integral of Three Associated Legendre Polynomials”. In : *Appl. Math. Lett.* 15 (2002), p. 541-546 (cf. p. 146).
- [30] D. ENRIGHT, F. LOSASSO et R. FEDKIW. “A Fast and Accurate Semi-Lagrangian Particle Level Set Method”. In : *Computers & Structures* 83.6 (fév. 2005), p. 479-490 (cf. p. 50, 63, 64, 145).
- [51] S. HYSING, S. TUREK, D. KUZMIN, N. PAROLINI, E. BURMAN, S. GANESAN et L. TOBISKA. “Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 60.11 (2009), p. 1259-1288 (cf. p. 138, 141, 146).
- [65] R. J. LEVEQUE. “High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flows”. In : *SIAM J. Numer. Anal.* 33.2 (avr. 1996), p. 627-665 (cf. p. 50, 63, 145).
- [71] H. A. MAVROMATIS. “A single-sum expression for the overlap of two associated Legendre polynomials”. In : *J. Phys. A : Math. Gen.* 32 (1999), p. 2601-2603 (cf. p. 146).
- [72] H. A. MAVROMATIS et R. S. ALASSAR. “A Generalized Formula for the Integral of Three Associated Legendre Polynomials”. In : *Appl. Math. Lett.* 12 (1999), p. 101-105 (cf. p. 146).
- [97] G. RACAH. “Theory of Complex Spectra. II”. In : *Phys. Rev.* 62 (nov. 1942), p. 438-462 (cf. p. 146).
- [101] M. SATO. “General formula of the Racah coefficient”. In : *Progress of Theoretical Physics* 13.4 (avr. 1955) (cf. p. 146).
- [105] D. SÉBILLEAU. “On the computation of the integrated products of three spherical harmonics”. In : *J. Phys. A : Math. Gen.* 31.34 (août 1998), p. 7157-7168 (cf. p. 146).
- [133] Y.-L. XU. “Fast evaluation of the Gaunt coefficients”. In : *Math. Comput.* 65.216 (oct. 1996), p. 1601-1612 (cf. p. 146).
- [134] Y.-L. XU. “Fast evaluation of Gaunt coefficients : recursive approach”. In : *J. Comput. Appl. Math.* 85 (1997), p. 53-65 (cf. p. 146).

Annexe A

La méthode de Cardan

La méthode de Cardan est une méthode de résolution d'équations polynomiales de degré 3. Ainsi, nous voulons résoudre l'équation suivante :

$$P(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d = 0$$

Pour cela, $P(x)$ est transformé par un changement de variable en :

$$P(z) = z^3 + pz + q \text{ avec } x = z - \frac{b}{3a}$$

En effet :

$$\begin{aligned} P(z) &= a \left(z - \frac{b}{3a} \right)^3 + b \left(z - \frac{b}{3a} \right)^2 + c \left(z - \frac{b}{3a} \right) + d \\ &= az^3 + \left(c - \frac{b^2}{3a} \right) z - \frac{b^3}{27a^2} + \frac{b^3}{9a^2} - \frac{bc}{3a^2} + d \end{aligned}$$

pour $a \neq 0$ et en regroupant les monômes en z , nous avons :

$$P(z) = 0 \Leftrightarrow P(z) = z^3 + \left(\frac{c}{a} - \frac{b^2}{3a^2} \right) z - \frac{b}{27a} \left(\frac{2b^2}{a^2} - \frac{9c}{a} \right) + \frac{d}{a} = 0$$

Nous posons ainsi p et q tels que :

$$\begin{aligned} p &= \frac{c}{a} - \frac{b^2}{3a^2} \\ q &= \frac{b}{27a} \left(\frac{2b^2}{a^2} - \frac{9c}{a} \right) + \frac{d}{a} \end{aligned}$$

Nous avons alors Δ , le discriminant de cette équation de la manière suivante :

$$\Delta = -(4p^3 + 27q^2)$$

Selon le signe de Δ , nous nous trouvons dans trois cas possibles :

1. Discriminant Δ négatif

L'équation $P(z) = 0$ admet une solution réelle et deux complexes conjugués. En posant $u = \left[\frac{-q + \sqrt{-\Delta/27}}{2} \right]^{1/3}$ et $v = \left[\frac{-q - \sqrt{-\Delta/27}}{2} \right]^{1/3}$, la solution réelle $z_1 = u + v$, d'où $x_1 = z_1 - b/(3a)$. Quant aux racines complexes, nous les obtenons ainsi :

$$\begin{cases} z_2 = ju + \bar{j}v \\ z_3 = j^2u + j\bar{v} \end{cases} \text{ avec } j = e^{i2\pi/3}$$

2. Discriminant Δ positif

Dans ce cas, nous avons trois solutions réelles. La forme trigonométrique de ces solutions est la suivante :

$$z_k = 2\sqrt{\frac{-p}{3}} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{-q}{2} \sqrt{\frac{27}{-p^3}} \right) + \frac{2k\pi}{3} \right), \text{ avec } k \in 0, 1, 2$$

Et nous retrouvons x_k avec la relation $x_k = z_k - b/(3a)$.

3. Discriminant Δ nul

Si $\Delta = 0$, l'équation admet deux solutions réelles, une simple et une double.

$$\begin{cases} z_1 = 3q/p \\ z_2 = z_3 = -3q/2p \end{cases}$$

Dans le cas où p et q sont nuls, l'équation admet une solution triple triviale.

Annexe B

Calcul de la courbure par la méthode LBO - Cas d'un sommet à 3 triangles

Afin d'éclaircir notre lanterne, nous exposons notre démarche pour effectuer les calculs analytiques de l'opérateur de Laplace-Beltrami. Soit la sphère Ω de rayon R , centrée au point O de coordonnées $(0, 0, 0)$. Sa surface est notée $\partial\Omega$. L'opérateur de Laplace-Beltrami est calculé au point x_0 . Le stencil est d'abord plan, régulier, avec $[x_0\tilde{x}_i] = L$, $i = 1, 2, 3$ et $x_0 \in \partial\Omega$. Les points \tilde{x}_i , $i = 1, 2, 3$ sont projetés sur $\partial\Omega$, obtenant ainsi les points x_i , $i = 1, 2, 3$.

La figure suivante résume la procédure :

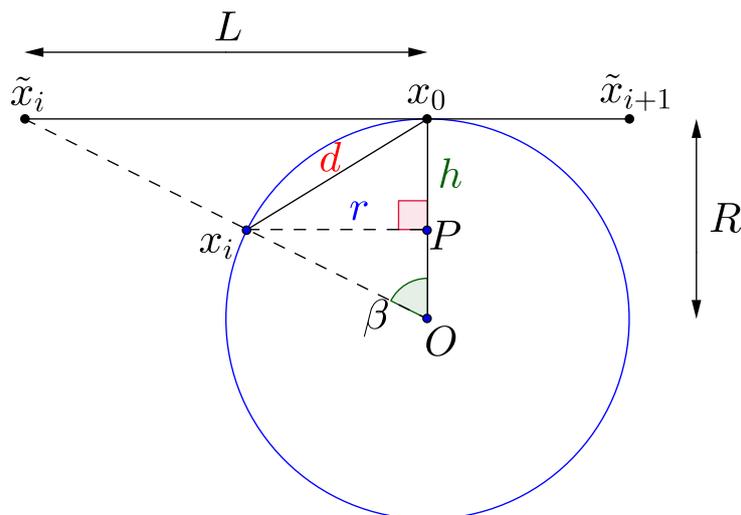


FIGURE B.1 – Vue de profil du stencil 3 et de sa projection sur la sphère de rayon R

P est le projeté de x_i sur l'axe (Ox_0) . Nous établissons les relations entre les différents paramètres $L, r = [x_iP], h = [x_0P]$.

$$\frac{L}{R} = \tan(\beta) \quad \text{or} \quad \tan(\beta) = \frac{2 \tan(\frac{\beta}{2})}{1 - \tan^2(\frac{\beta}{2})}$$

$$\text{et} \quad \tan(\frac{\beta}{2}) = \frac{d}{2\sqrt{R^2 - \frac{d^2}{4}}}$$

En remplaçant et après simplification, nous obtenons :

$$L = \frac{d\sqrt{1 - \frac{d^2}{4R^2}}}{1 - \frac{d^2}{2R^2}}$$

Par le théorème de Thalès, nous avons :

$$\frac{R}{\sqrt{L^2 + R^2}} = \frac{R - h}{R}$$

En utilisant l'expression de L , et après simplification, nous aboutissons à :

$$h = \frac{d^2}{2R}$$

Pour finir, avec le théorème de Pythagore, nous trouvons r :

$$r^2 + h^2 = d^2 \Leftrightarrow r^2 = d^2 - h^2 = d^2 - \frac{d^4}{4R^2}$$

Ainsi, l'expression de r est :

$$r = d \sqrt{1 - \frac{d^2}{4R^2}}$$

Les points $(x_i)_{i \in \mathbb{N}}$ ont pour coordonnées :

$$x_0 = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ R \end{Bmatrix} \text{ et pour } i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_{x_0} \rrbracket, \quad x_i = \begin{Bmatrix} r \cos\left(\frac{2\pi(i-1)}{\mathcal{N}_{x_0}}\right) \\ r \sin\left(\frac{2\pi(i-1)}{\mathcal{N}_{x_0}}\right) \\ R - h \end{Bmatrix}$$

Nous rappelons l'expression de l'opérateur de Laplace-Beltrami tel que décrite dans [76] :

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{2\mathcal{A}_{mixed}} \sum_{j=1}^{\mathcal{N}_i} (\cot \alpha_{ij} + \cot \beta_{ij})(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$$

Ayant fait l'hypothèse d'un stencil régulier, nous avons que :

$$\cot \alpha_{ij} = \cot \beta_{ij} = \cot \alpha$$

D'où dans le cas de stencils réguliers, l'opérateur de Laplace-Beltrami se réécrit :

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}_i) = \frac{\cot \alpha}{\mathcal{A}_{mixed}} \sum_{j=1}^{\mathcal{N}_i} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \frac{\cot \alpha}{\mathcal{A}_{mixed}} \sum_{j=1}^{\mathcal{N}_i} \mathbf{u}_{ij}$$

Étant calculé au point x_0 , nous avons :

$$\mathbf{u}_{0i} = x_0 - x_i = \begin{Bmatrix} -r \cos\left(\frac{2\pi(i-1)}{\mathcal{N}_{x_0}}\right) \\ -r \sin\left(\frac{2\pi(i-1)}{\mathcal{N}_{x_0}}\right) \\ h \end{Bmatrix}$$

Nous pouvons remarquer, qu'à un facteur $-r$ près, les deux premières coordonnées de \mathbf{u}_{0i} constituent les parties réelles et imaginaires des racines n -ièmes de l'unité (ici avec $n = \mathcal{N}_{x_0}$). Or :

$$\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{x_0}} \exp\left(i \frac{2\pi(k-1)}{\mathcal{N}_{x_0}}\right) = 0$$

Ainsi, nous pouvons simplifier l'expression de $\mathbf{K}(\mathbf{x}_0)$:

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}_0) = \frac{\cot \alpha}{\mathcal{A}_{mixed}} \mathbf{u}_{\mathcal{N}_{x_0}} \quad \text{avec} \quad \mathbf{u}_{\mathcal{N}_{x_0}} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{N}_{x_0} h \end{Bmatrix}$$

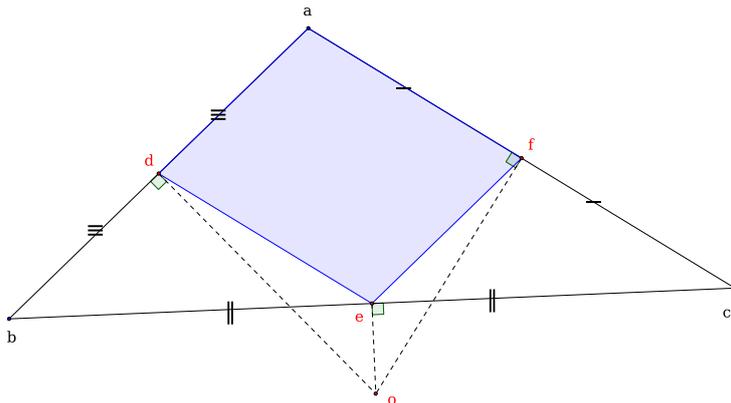


FIGURE B.2 – Aire utilisée pour construire \mathcal{A}_{mixed} dans le cas d'un triangle obtus.

Reste plus qu'à expliciter $\cot \alpha$ et \mathcal{A}_{mixed} . Commençons par \mathcal{A}_{mixed} . Dans le cas du stencil 3, elle s'exprime comme suit :

$$\mathcal{A}_{mixed} = \frac{3}{2}A_T \quad \text{avec} \quad A_T = \text{aire du triangle } (x_0x_1x_2)$$

$$\mathbf{a} = x_1\vec{x}_2 = \begin{Bmatrix} -\frac{3}{2}r \\ r\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{b} = x_1\vec{x}_0 = \begin{Bmatrix} -r \\ 0 \\ h \end{Bmatrix}$$

Nous calculons A_T en passant par le produit vectoriel de \mathbf{a} et \mathbf{b} :

$$\begin{aligned} 4A_T^2 &= \|\mathbf{a} \times \mathbf{b}\|^2 \\ \mathbf{a} \times \mathbf{b} &= \begin{Bmatrix} \frac{rh\sqrt{3}}{2} \\ \frac{3rh}{2} \\ \frac{r^2\sqrt{3}}{2} \end{Bmatrix} \\ \text{D'où } 4A_T^2 &= 3(rh)^2 + \frac{3}{4}r^2 \\ &= \frac{3}{4}r^2(r^2 + 4h^2) \\ &= \frac{3}{4}d^2 \left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right) \left[d^2 \left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right) + \frac{d^4}{R^2} \right] \\ 4A_T^2 &= \frac{3}{4}d^4 \left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right) \left(1 + \frac{3d^2}{4R^2}\right) \\ \text{Donc } A_T &= \frac{d^2\sqrt{3}}{4} \sqrt{\left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right) \left(1 + \frac{3d^2}{4R^2}\right)} \end{aligned}$$

Nous en tirons donc \mathcal{A}_{mixed} dans le cas d'un stencil 3 :

$$\mathcal{A}_{mixed} = \frac{3\sqrt{3}}{8}d^2 \sqrt{\left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right) \left(1 + \frac{3d^2}{4R^2}\right)}$$

Ensuite, nous calculons $\cot \alpha$ avec la formule :

$$\begin{aligned} \cot \alpha &= \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{\sqrt{\|\mathbf{a}\|^2 \|\mathbf{b}\|^2 - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2}} \\ \|\mathbf{a}\|^2 &= 3r^2 = 3d^2 \left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right) \\ \|\mathbf{b}\|^2 &= r^2 + h^2 = d^2 \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} &= \frac{3}{2}r^2 = \frac{3}{2}d^2 \left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right) \\ \text{D'où } \cot \alpha &= \frac{\frac{3}{2}d^2 \left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right)}{\sqrt{3d^4 \left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right) - \frac{9}{4}d^4 \left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right)^2}} \\ &= \frac{\sqrt{1 - \frac{d^2}{4R^2}}}{\sqrt{\frac{4}{3} - \left(1 - \frac{d^2}{4R^2}\right)}} \\ \text{Donc } \cot \alpha &= \sqrt{3} \frac{\sqrt{1 - \frac{d^2}{4R^2}}}{\sqrt{1 + \frac{3d^2}{4R^2}}} \end{aligned}$$

Nous réécrivons donc le rapport $\frac{\cot \alpha}{\mathcal{A}_{mixed}}$:

$$\frac{\cot \alpha}{\mathcal{A}_{mixed}} = \frac{8}{3d^2 \left(1 + \frac{3d^2}{4R^2}\right)}$$

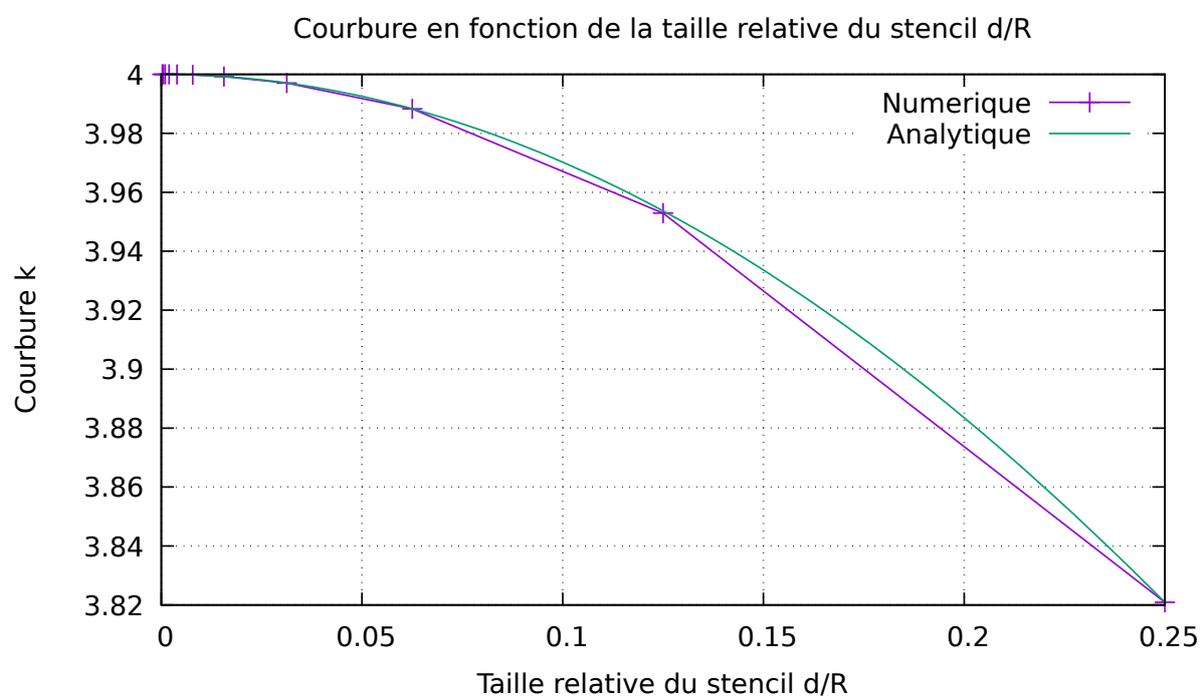
Nous pouvons ainsi expliciter l'opérateur de Laplace-Beltrami pour un stencil régulier de 3 :

$$\begin{aligned} \mathbf{K}(\mathbf{x}_0) &= \frac{8}{3d^2 \left(1 + \frac{3d^2}{4R^2}\right)} \mathbf{u}_{\mathcal{N}_{x_0}} \\ \mathcal{N}_{x_0} &= 3 \\ \mathbf{K}(\mathbf{x}_0) &= \frac{8h}{d^2 \left(1 + \frac{3d^2}{4R^2}\right)} \mathbf{n}, \text{ avec } \mathbf{n} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix}, \text{ et } h = \frac{d^2}{2R} \\ \text{Ainsi, } \mathbf{K}(\mathbf{x}_0) &= \frac{\frac{4}{R}}{1 + \frac{3d^2}{4R^2}} \mathbf{n} \end{aligned}$$

Nous en déduisons la courbure $\kappa_H = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)$:

$$\begin{aligned} \kappa_H &= \frac{1}{2} \|\mathbf{K}(\mathbf{x}_0)\| \\ &= \frac{\frac{2}{R}}{1 + \frac{3d^2}{4R^2}} \end{aligned}$$

Pour une sphère de rayon R , la courbure est $\kappa_H^{exact} = \frac{1}{R}$. Le calcul analytique avec la formule de [76] donne une courbure $\kappa_H^{an.} = \frac{\frac{2}{R}}{1 + \frac{3d^2}{4R^2}}$. Ce que nous retrouvons avec les simulations numériques :



Annexe C

Complément sur les comparaisons de méthodes

C.1 Errors for 20%-disturbed meshes

As described in the body of the present article, when the initial mesh was made up of equilateral triangles, the remeshing process has destroyed the regular structure of the discrete surface. As a consequence, the measured errors were much larger than those recorded for the stationary surface, especially for the curvature. Therefore, introducing random disturbances on the initial location of the vertices does not significantly modify, neither the behaviour, nor the level of the errors. This remark is valid whatever the Q -value, as well for the exact advection (Eq. 3.25) :

- see Fig. C.1 versus Fig. 3.20 for $Q < 0$,
- see Fig. C.4 versus Fig. 3.24 for $Q > 0$

as for the transport numerical scheme :

- see Fig. C.2 versus Fig. 3.21 for $Q < 0$,
- see Fig. C.5 versus Fig. 3.25 for $Q > 0$.

and for the CPU-cost and efficiency :

- see Fig. C.3 versus Fig. 3.22 for $Q < 0$,
- see Fig. C.6 versus Fig. 3.26 for $Q > 0$.

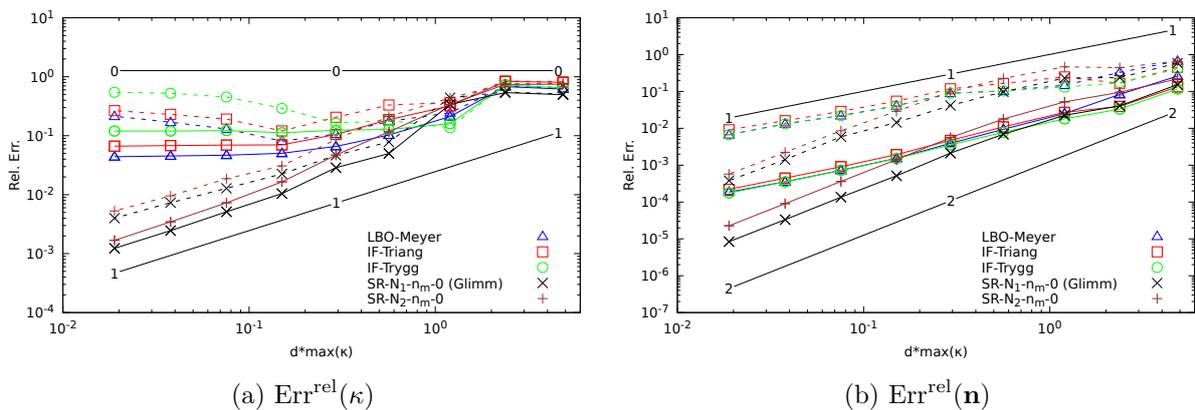


FIGURE C.1 – Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$ with exact transport - $Q < 0$

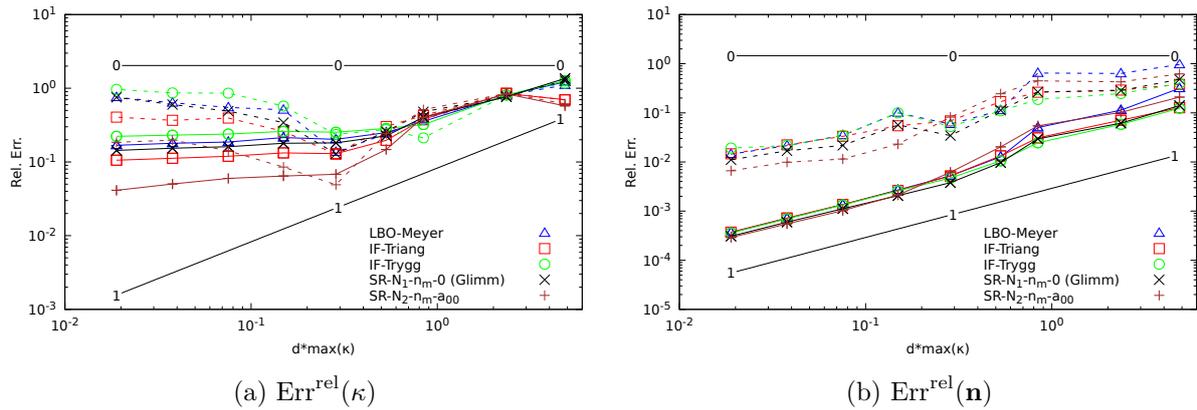


FIGURE C.2 – Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$ with Lagrangian transport - $Q < 0$

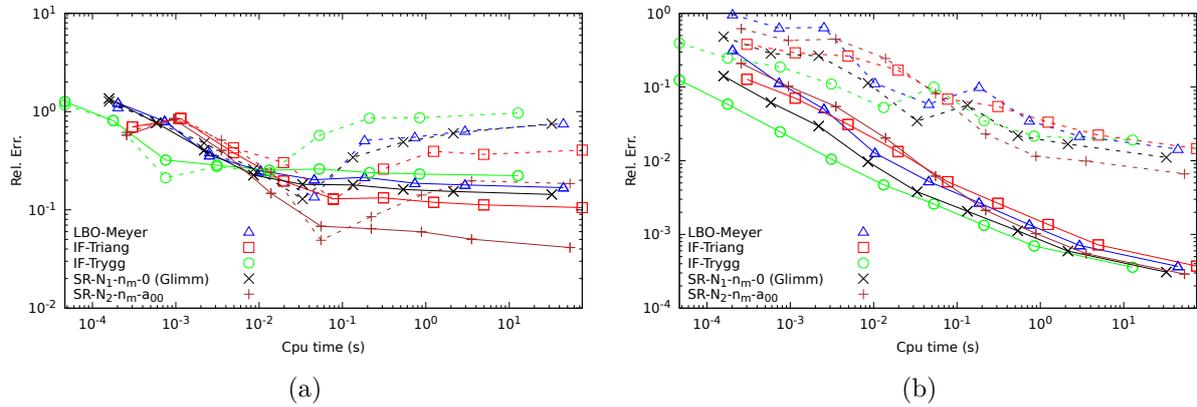


FIGURE C.3 – Relative errors on κ (a) and \mathbf{n} (b) according to CPU time in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms, $p = 20\%$ - $Q < 0$ and numerical transport.

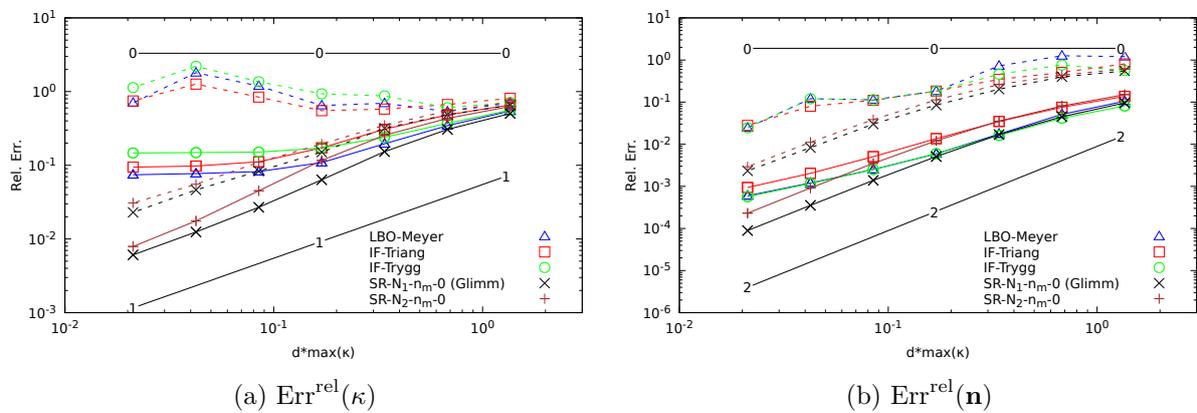


FIGURE C.4 – Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$ with exact transport - $Q > 0$

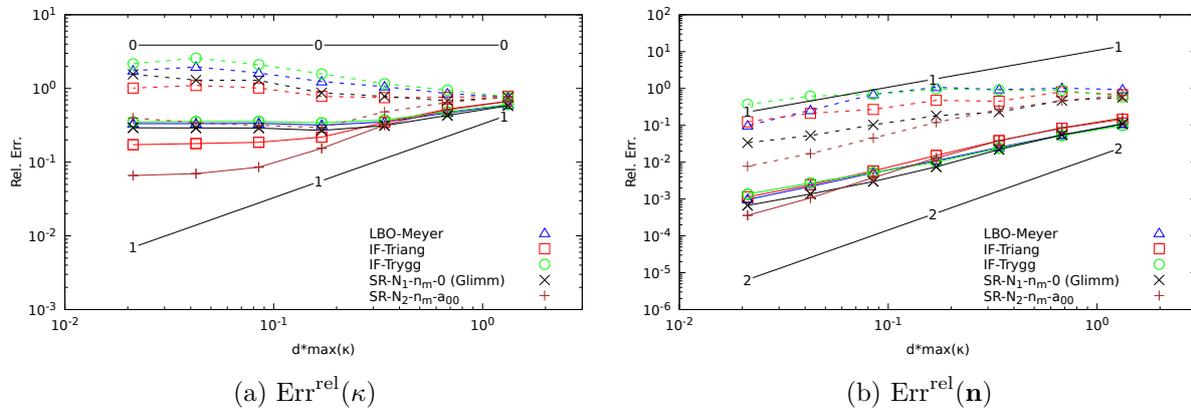


FIGURE C.5 – Relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ and \mathbf{n} , $p = 20\%$ with Lagrangian transport - $Q > 0$

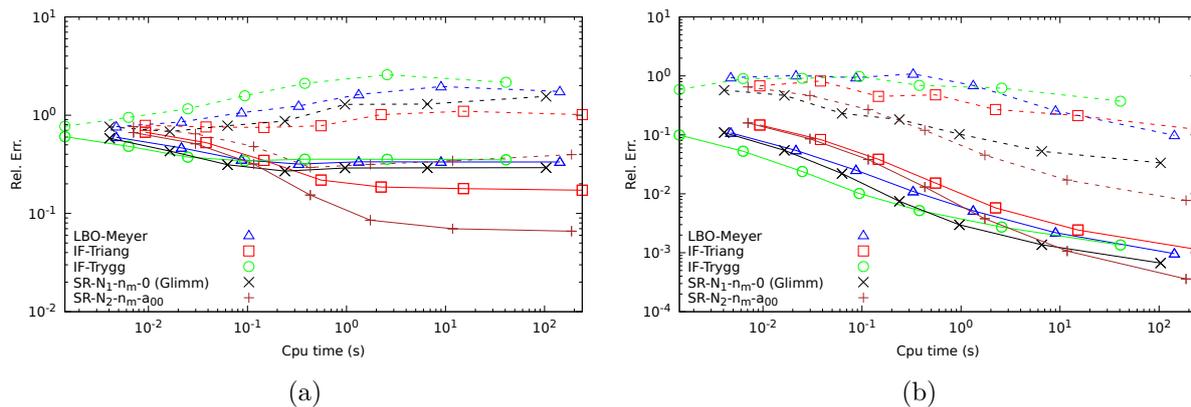


FIGURE C.6 – Relative errors on κ (a) and \mathbf{n} (b) according to CPU time in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms, $p = 20\%$ - $Q > 0$ and numerical transport.

Annexe D

Complément sur les méthodes de Reconstruction de Surface

D.1 Peculiar stencil for the calculation of the SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 method

The calculation of the curvature with the Surface Reconstruction SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 [26] may lead to very bad approximations, as shown in Fig. 3.24a for the L_∞ -norm. To better understand the reason of such a result, the vertices at the root of these large errors have to be identified. To this end, the surface shape is subdivided into three sub-domains \mathcal{D}_i , characterized by very different principal curvature values (Fig. D.1) : \mathcal{D}_1 corresponds to the nearly flat annular part, \mathcal{D}_2 is the

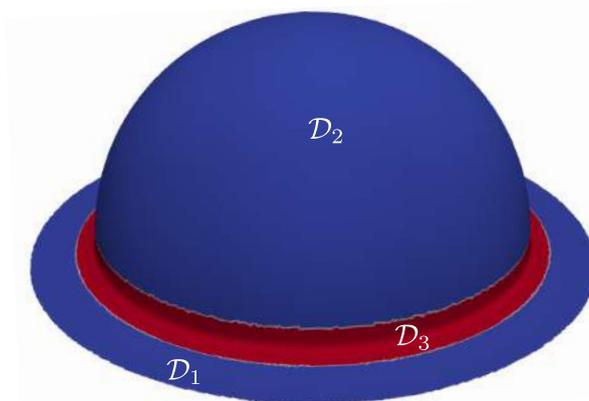


FIGURE D.1 – Subdivision of the discrete mesh in three zones.

hemispherical surface and \mathcal{D}_3 is referred to as the narrow strip which connects the two previous domains.

Figure D.2 summarizes the relative errors on the curvature calculation as a function of the mesh size $d \times \max_{x_i \in \mathcal{D}_j}(\kappa(x_i))$, for $1 \leq j \leq 3$ and the usual numerical methods. The comparison of these curves with Fig. 3.24a indicates that the increase in the relative error is due to vertices located in the sub-domain \mathcal{D}_3 where the two principal curvatures are large and have opposite signs (Fig. D.2c).

A thoroughly examination of the vertices with large errors shows that the nodes used to define the fitted surface $Z = f(X, Y)$ (Eq. 3.14) are distributed in a peculiar way. Due to the refinement procedure, which consists in adding a vertex at the middle of an edge, three nodes are compulsorily aligned so that their projections onto the local plane $Z = 0$ belong to an unique

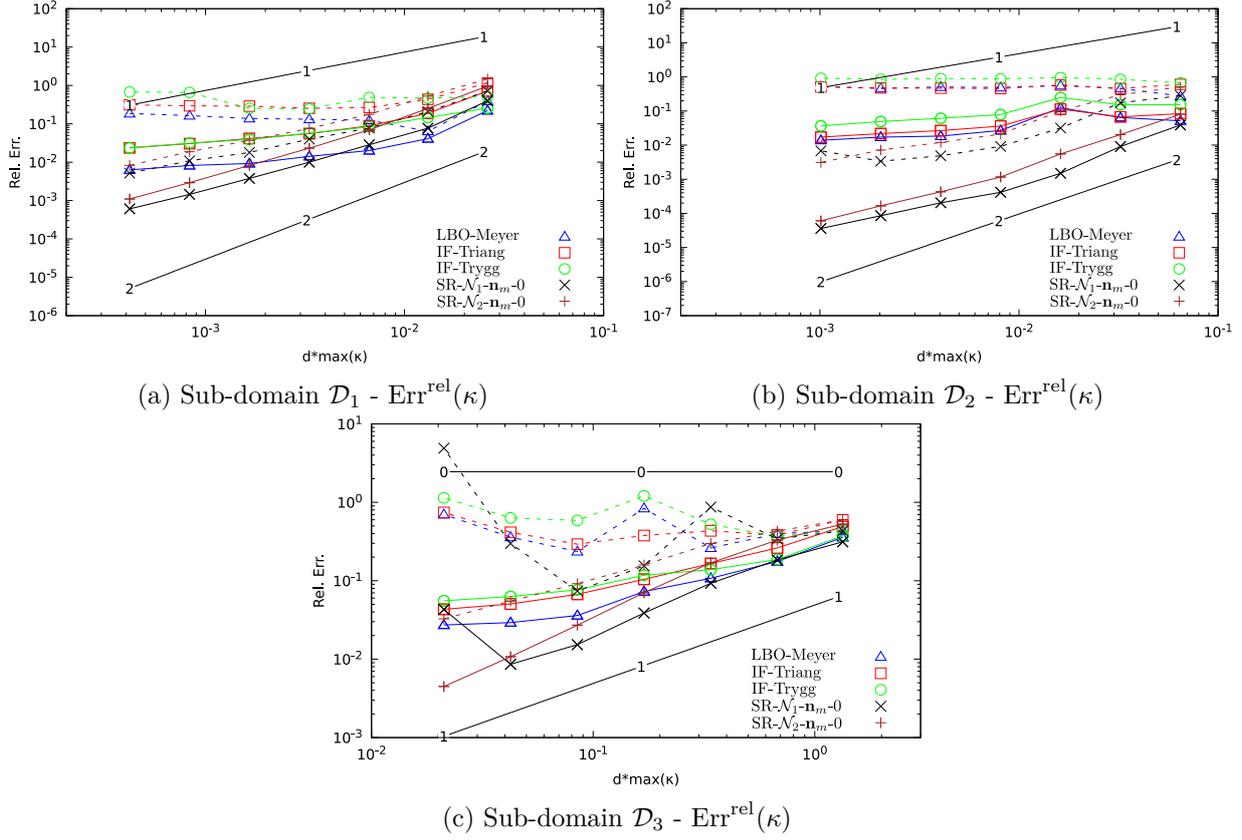


FIGURE D.2 – Decomposition per zone of the relative errors in L_2 (continuous line) and L_∞ (dash line) norms on κ , $p = 0\%$ with exact transport - $Q > 0$

straight line noted Δ . Furthermore, this situation often produces a first neighbourhood \mathcal{N}_1 with 4 triangles sharing the same vertex (Fig. D.3), what does not provide enough points to determine in a unique way the fitted surface. Thus, an arbitrary additional vertex must also be taken into

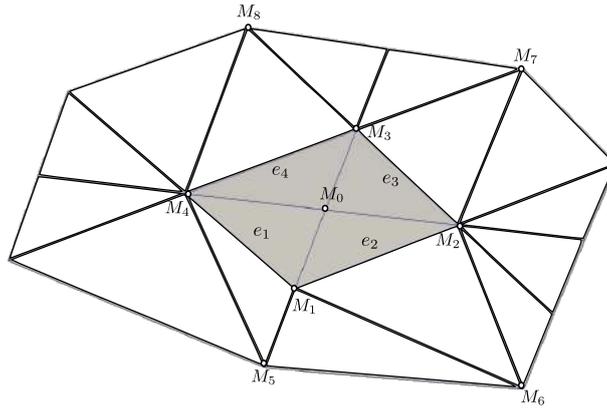


FIGURE D.3 – Stencil of the marker where the curvature and normal vector are not well evaluated.

account in the second neighbourhood $\mathcal{N}_2 \setminus \mathcal{N}_1$ to calculate the function $Z = f(X, Y)$. Based on our meshes, the bad curvature evaluations seem resulting from configurations where the fifth point, projected over the $Z = 0$ plane, is very close to the straight line Δ (four points nearly aligned). To confirm this intuition, the four nodes belonging to the first neighbourhood \mathcal{N}_1 of a vertex labelled M_0 , located in the \mathcal{D}_2 domain, have been extracted from the mesh, whereas the fifth node M_5 is able to move all around M_0 , while remaining on the analytical surface. Let the angle $\theta = \widehat{M'_5 M'_0 M'_1}$, with M'_i the projection of M_i onto the plane $Z = 0$ and the length $M'_5 M'_0$

kept constant, then the relative error on the curvature is maximal when $\theta = 0 [\pi]$ (Fig. D.4). The

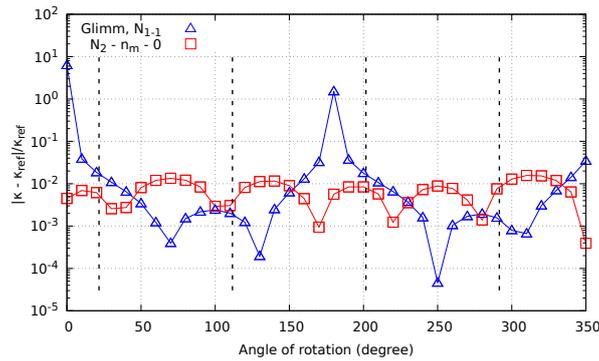


FIGURE D.4 – Relative error on κ in function of the angle of rotation θ of the markers $M_i \in (\mathcal{N}_2 \setminus \mathcal{N}_1)$, for the variant "Glimm - \mathcal{N}_{1-1} ". The vertical dash lines are the principal directions.

level difference measured on the curvature error may reach three decades between the average value of order 0.01 and the maximum ≈ 10 . Before ending this section, it is worth noticing that such a nearly alignment of vertices happens also in the meshes of the other domains \mathcal{D}_1 and \mathcal{D}_2 (Fig. D.1). However, in those cases, the two principal curvatures are almost identical and therefore, the lose of accuracy in one direction is probably counterbalanced by the other nodes taking part in the surface fitting. On the other hand, when the principal curvatures are significantly different, like in \mathcal{D}_3 domain, the lose of accuracy cannot be compensated by the other vertices.

To conclude this section, the use of the Surface Reconstruction SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0 by DU et al. [26] must be used carefully when the first neighbourhood does not have enough degree of freedom to calculate the fitted surface. One way to overcome this issue is to always consider the two first neighbourhoods \mathcal{N}_2 to avoid degenerated situations as described here-above.

Annexe E

Effet de la pondération dans les méthodes SR

Nous profitons également de cette étude numérique pour tester l'introduction d'une pondération lors de l'établissement des méthodes de Reconstruction de surface. En effet, jusqu'ici, nous avons utilisé une pondération de 1 dans la méthode des moindres carrés servant à établir l'équation locale de la surface discrète. L'obtention de l'équation locale au marqueur m , de coordonnées \bar{x}_m , s'obtient en minimisant le résidu *RMS* évoqué dans l'équation (E.1).

$$RMS(m) = \sum_{m_i \in \mathcal{N}_k^*(m)} \omega_i [f(X_i, Y_i) - Z_i]^2 \quad (\text{E.1})$$

avec ω_i la pondération associée au marqueur m_i , de coordonnées locales X_i, Y_i, Z_i , f la fonction polynomiale définie par l'équation (3.14), page 78, et $k \in \{1, 2\}$ selon le choix du premier voisinage pour les méthodes SR- \mathcal{N}_1^* ou du second voisinage pour les méthodes SR- \mathcal{N}_2^* . Concernant la pondération ω_i , nous faisons le choix de l'exprimer sous la forme $1/(1+x^2)$, comme présentée dans l'équation (E.2).

$$\omega_i = \frac{1}{1 + \left[\frac{\|\bar{x}_i - \bar{x}_m\| \times N}{\min_{m_i \in \mathcal{N}_k^*(m)} \|\bar{x}_i - \bar{x}_m\|} \right]^2} \quad (\text{E.2})$$

avec, $N \in \{0, 1, 2, 4, 8\}$, un entier permettant de jouer sur la localité de la reconstruction. De ce fait, plus l'on s'éloigne du marqueur central m , moins les marqueurs de son voisinage ont de l'importance dans l'établissement de l'équation locale de la surface.

E.1 Analyse de l'influence de la pondération et des perturbations sur la distribution surfacique

Nous nous intéressons dans cette partie à la caractérisation de la densité surfacique de courbure sur une famille d'ellipsoïdes de volume fixé. Deux paramètres rentrent en ligne de compte dans notre étude, à savoir les perturbations du maillage de l'interface, d'amplitude maximale $p \in [0, 0.4]$, et l'introduction ou non d'une pondération ω_i lors de l'établissement de l'équation locale de la surface par la méthode des moindres carrés.

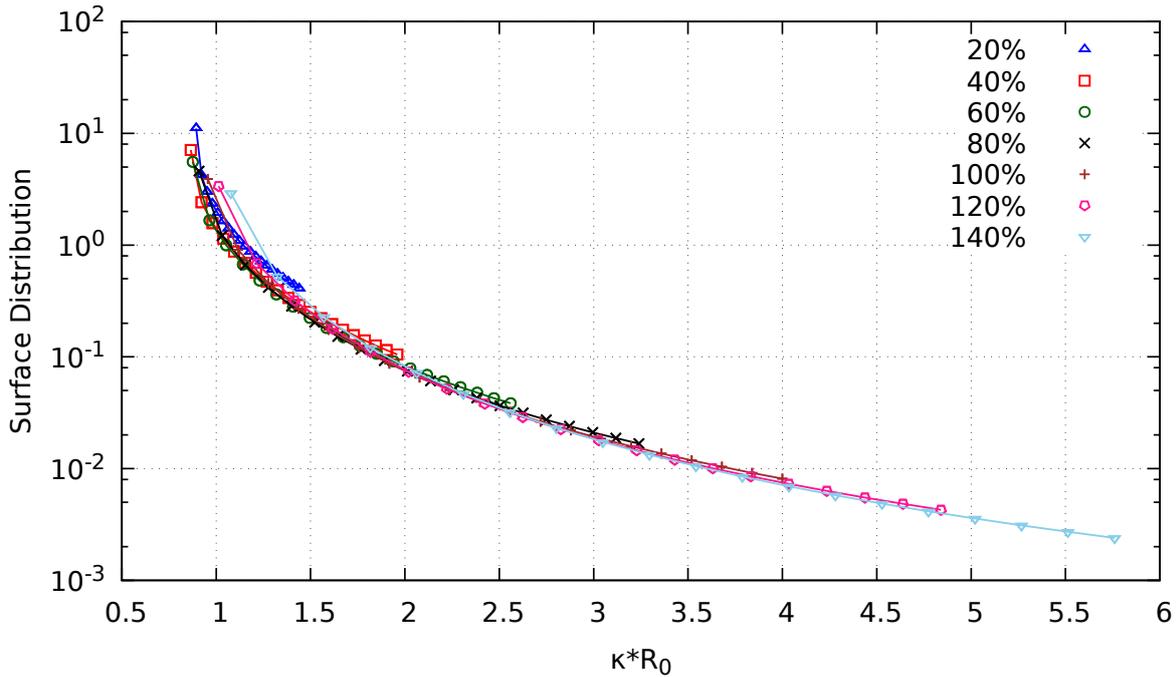


FIGURE E.1 – Evolution de la densité surfacique de courbure pour une famille d'ellipsoïdes de divers étirements.

Distribution surfacique de courbure pour une famille d'ellipsoïdes de volume constant

Avant toute chose, nous présentons dans la figure E.1 la densité surfacique de courbure théorique pour une famille d'ellipsoïdes, construite selon les relations (4.12) et (4.13), avec $\alpha \in \{20\%, 40\%, 60\%, 80\%, 100\%, 120\%, 140\%\}$. Ces ellipsoïdes sont générées à partir d'une sphère, de maillage initial $r/d = 256$. Les courbures sont calculées de manière analytique. La plage de courbure présente sur chaque ellipsoïde est divisée en 20 classes de tailles identiques.

Comme nous pouvons l'observer, pour un faible étirement ($\alpha = 20\%$), la df_S est très proche de la forme d'un pic. En effet, pour de faibles valeurs de α , l'ellipsoïde est presque assimilable à une sphère. Cette dernière ne présente qu'une seule courbure, et sa distribution df_S est un pic localisé à la valeur de sa courbure. Plus la valeur de α s'éloigne de 0, plus la distribution s'étale, avec l'apparition de zones de fortes courbures. Toutefois les zones de faible courbure, situées au centre de l'ellipsoïde, continuent d'occuper la majeure partie de la surface. Les régions de forte courbure sont focalisées aux extrémités allongées, couvrant par conséquent une surface bien moindre (de l'ordre de 10^{-3} pour les fortes courbures sur l'ellipsoïde de paramètre $\alpha = 140\%$).

Restriction des tests aux méthodes de reconstruction de surface

L'idée des tests menés dans cette partie est de voir la justesse avec laquelle nos différentes méthodes arrivent à retrouver ces distributions surfaciques de courbures. Pour cela, nous nous servons de la mesure introduite en (4.14) qui nous donnent l'écart en norme L_2 et L_∞ entre nos méthodes et la solution analytique, et ceci pour différentes finesse de maillages de l'interface, représentées par la quantité $d_{moy} * \kappa_{max}$. Afin de justifier notre choix de nous restreindre qu'aux méthodes de reconstruction de surface SR- \mathcal{N}_1^* et SR- \mathcal{N}_2^* , nous montrons, dans un premier temps, les résultats obtenus en se servant de la méthode LBO, avec différentes perturbations initiales du maillage (Fig. E.2).

Dans des configurations idéales, à savoir des ellipsoïdes proches de la sphère ($\alpha = 20\%$) et

aucune perturbation du maillage ($p = 0$), la méthode LBO présente un ordre 1 de convergence en norme L_2 et des erreurs relatives très faibles pour la résolution la plus fine (10^{-3} pour $d_{moy} * \kappa_{max} = 8 \times 10^{-3}$, Fig. E.2a). Cette convergence en norme L_2 est perdue dès l'introduction de perturbations dans le maillage de l'interface, avec des erreurs relatives restant inférieures à 10^{-2} (Fig. E.2b et E.2c). Cependant, les erreurs en norme L_∞ ne convergent pas, voire divergent avec les perturbations du maillage. De surcroît, plus on s'éloigne de la sphère (α prenant des valeurs grandes), plus le comportement des erreurs devient erratique, avec des erreurs relatives pouvant dépasser 10^1 .

Tous ces éléments nous confortent à mettre de côté les méthodes LBO. Reste à tester les méthodes de reconstruction de surface en mettant en lumière leur sensibilité aux perturbations p du maillage et l'utilisation de moindres carrés pondérés.

Influence de la pondération ω_i

Nous nous plaçons dans la configuration où aucune perturbation n'est introduite sur le maillage de la sphère initiale servant à générer la famille d'ellipsoïdes. Le poids ω_i (E.2) introduit dans l'obtention de l'équation locale de la surface par minimisation du résidu (E.1) prend en compte l'éloignement des points par rapport au marqueur central, et donc leur influence de l'établissement de l'équation locale. Le facteur $N \in \{0, 1, 2, 4, 8\}$ inséré dans l'expression de ω_i permet d'avoir différentes valeurs de poids pour le même poids, tout en gardant la forme générale de la pondération choisie en $1/(1+x^2)$. Nous présentons dans la figure (cite) les erreurs en norme L_2 et L_∞ sur les distributions surfaciques de courbure pour les valeurs de $N \in \{0, 1, 8\}$, les autres étant identiques. Les erreurs sont calculées selon (4.14).

Contrairement à ce que nous avons avec les méthodes LBO, les méthodes SR (ici SR- \mathcal{N}_1 - \mathbf{n}_m -0) convergent. Quelle que soit la pondération utilisée, nous observons une convergence de 2 en norme L_2 sur des structures proches de la sphère, à $\alpha = 20\%$. Cet ordre diminue lorsque la structure s'éloigne de plus en plus de la sphère, pour se stabiliser à 1 sur la gamme d'étirements employés. La norme L_∞ converge également à l'ordre 1 sauf pour les étirements correspondant à $\alpha = 60\%$ et $\alpha = 80\%$, où la convergence est de 0.5. A résolution de maillage la plus fine (de l'ordre de $d_{moy} * \kappa_{max} = 10^{-2}$), aucune différence notable ne ressort entre la version sans pondération $N = 0$ (Fig. E.3a) et les versions avec pondération $N = 1$, $N = 8$ (Fig. E.3b-E.3c). Cela s'explique par le fait que la distance entre les marqueurs de l'interface est suffisamment petite pour capter toutes les courbures de l'interface. Ainsi, l'amélioration apportée par la prise en compte de la localité des marqueurs devient négligeable.

A contrario, l'introduction de la pondération améliore les résultats sur les maillages grossiers. Dans notre cas, en particulier pour les étirements $\alpha = 120\%$ et $\alpha = 140\%$ à $d_{moy} * \kappa_{max} = 1$ (Fig. E.3b-E.3c). Bien que ces erreurs restent relativement élevées, il n'en disconvient pas que la pondération les réduit comparativement au cas $N = 0$. En effet, la structure étant maillé grossièrement, les modifications topologiques entre deux marqueurs risquent de ne pas être captées. Donner un poids qui décroît avec la distance mitige ce manque d'information inhérent au maillage. Toutefois, nous ne remarquons pas d'écarts significatifs entre $N = 1$ et $N = 8$.

Ainsi, au vu des résultats de cette partie mettant en avant l'amélioration des erreurs pour des maillages grossiers par l'introduction de pondération non uniforme, nous présentons l'impact des perturbations p du maillage initial que pour $N = 1$. Il est à noter que les calculs ont également été fait pour $N \in \{0, 1, 2, 4, 8\}$.

Influence de la perturbation p

Une perturbation d'amplitude maximale p du maillage initial de la sphère génératrice de la famille d'ellipsoïdes est introduite. La figure E.4 synthétise les résultats pour $p \in \{0\%, 20\%, 40\%\}$

A $p = 20\%$ de perturbation (Fig. E.4b), la convergence en norme L_2 de la distribution df_S commence à s'infléchir pour des structures sphéroïdales ($\alpha = 20\%$ et $\alpha = 40\%$) mais reste entre

1.5 et 2. Les structures ellipsoïdales présentent quant à elles sur leur maillage une convergence en norme L_2 et L_∞ de 1. A $p = 40\%$ de perturbation (Fig. E.4c), toutes les structures sont à la même enseigne et continuent de converger à l'ordre 1 en norme L_2 et L_∞ . Bien que les erreurs soient pour grandes pour $\alpha = 20\%$ et $\alpha = 40\%$ entre le cas $p = 0\%$ et $p = 40\%$ (Fig. E.4a et E.4c), celles pour $\alpha \geq 60\%$ restent inchangées.

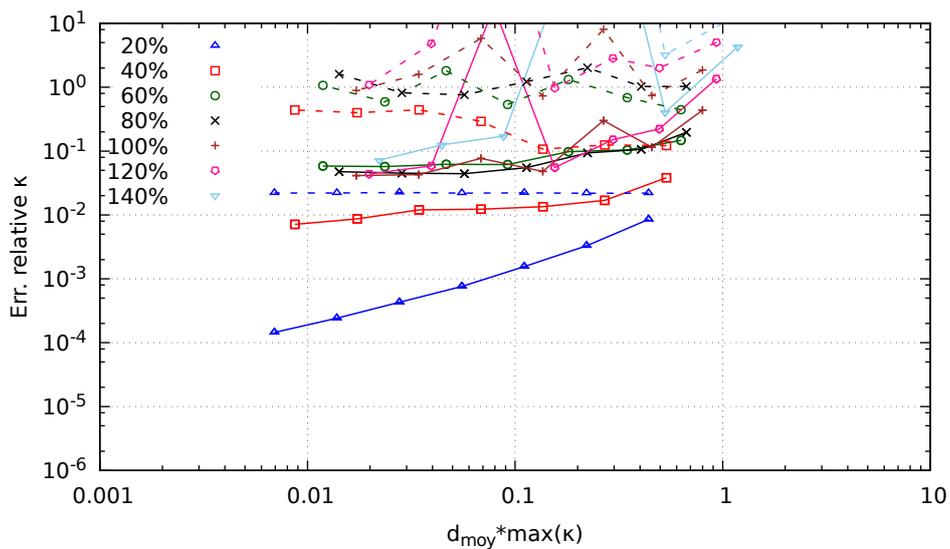
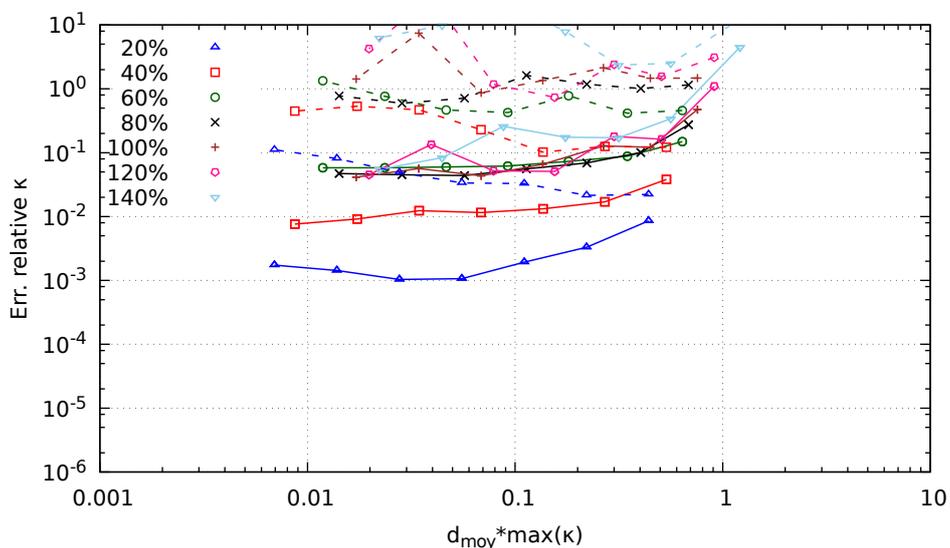
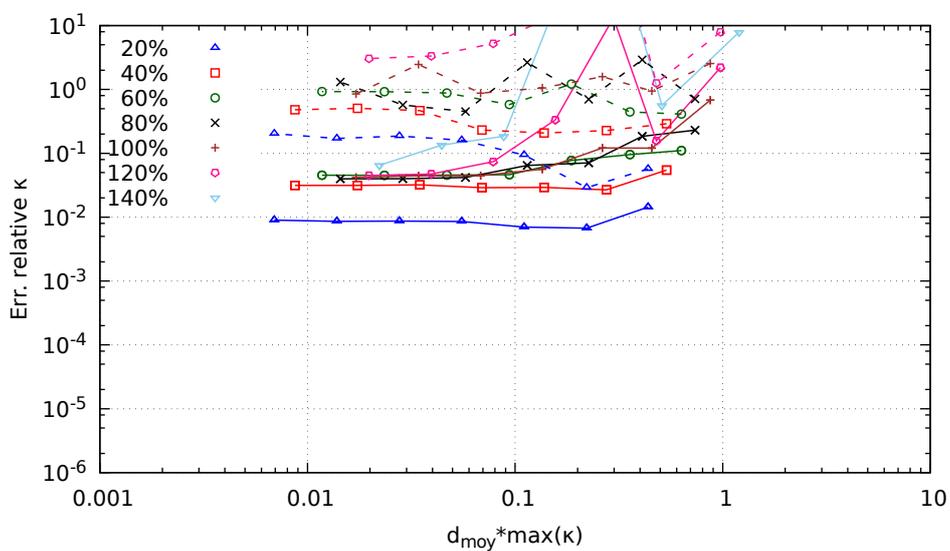
(a) Perturbation $p = 0\%$ (b) Perturbation $p = 10\%$ (c) Perturbation $p = 40\%$

FIGURE E.2 – Erreurs relatives en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (tiret) sur la densité surfacique de courbure d'une famille d'ellipsoïdes, avec la méthode LBO.

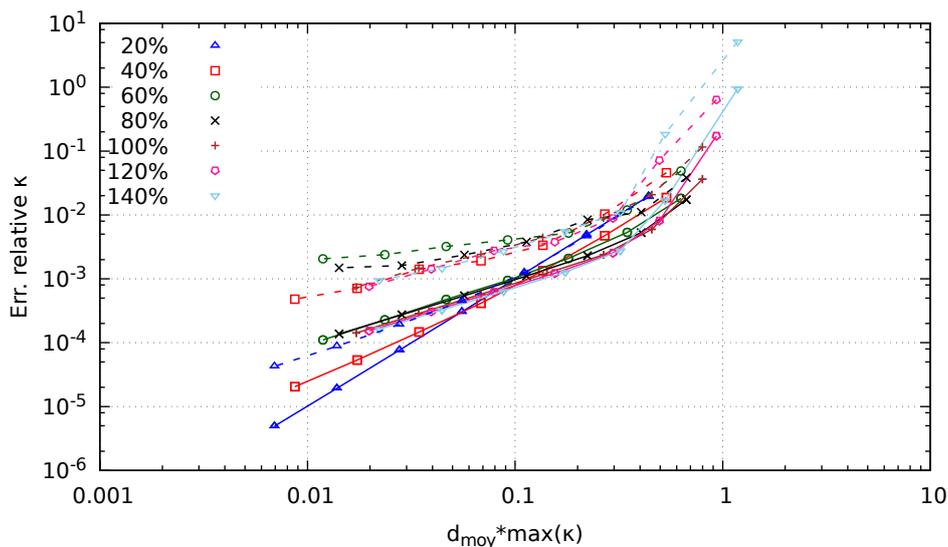
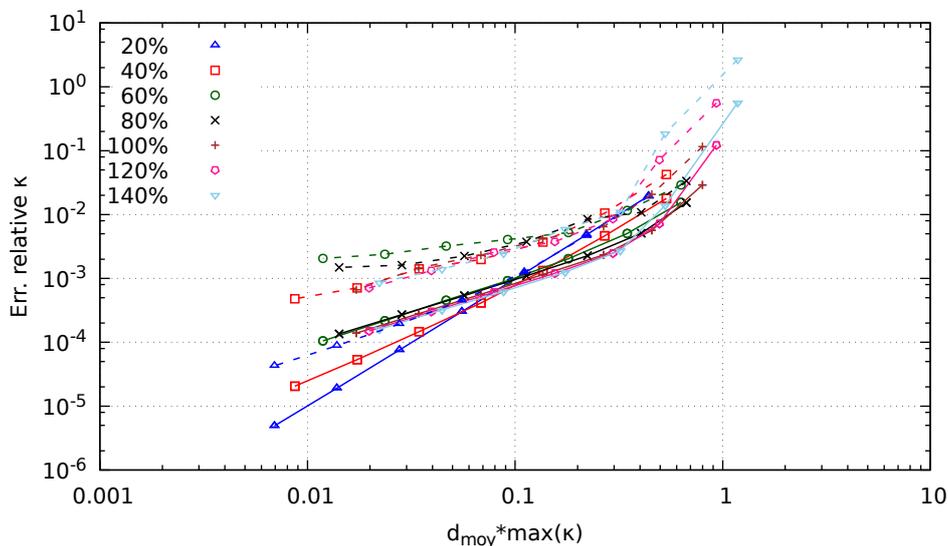
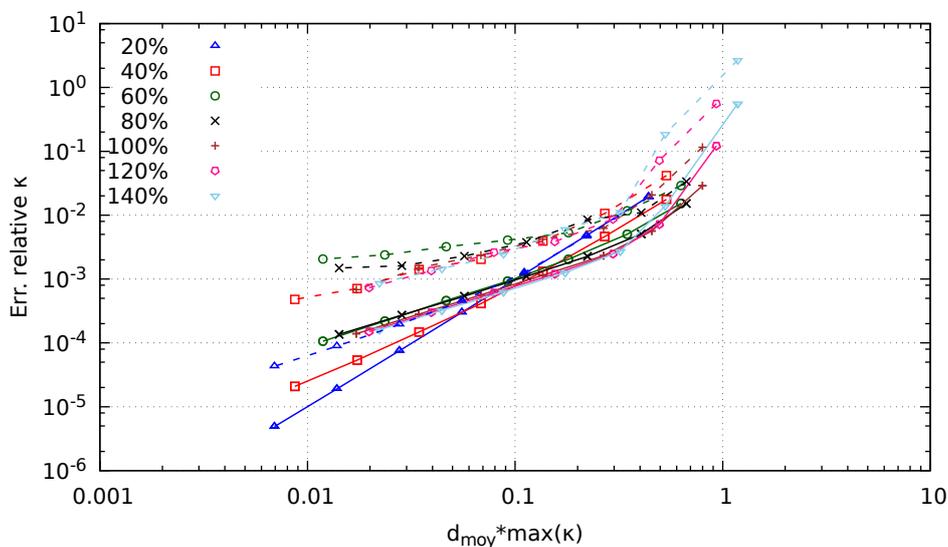
(a) $N = 0$ (b) $N = 1$ (c) $N = 8$

FIGURE E.3 – Influence de la pondération - Erreurs relatives en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (tiret) sur la densité surfacique de courbure d'une famille d'ellipsoïdes, à perturbation $p = 0\%$, avec la méthode $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$.

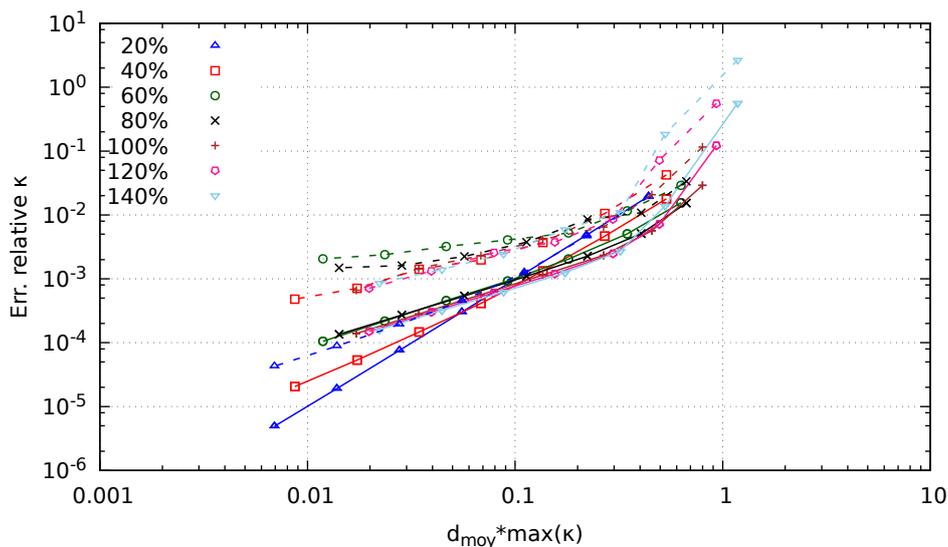
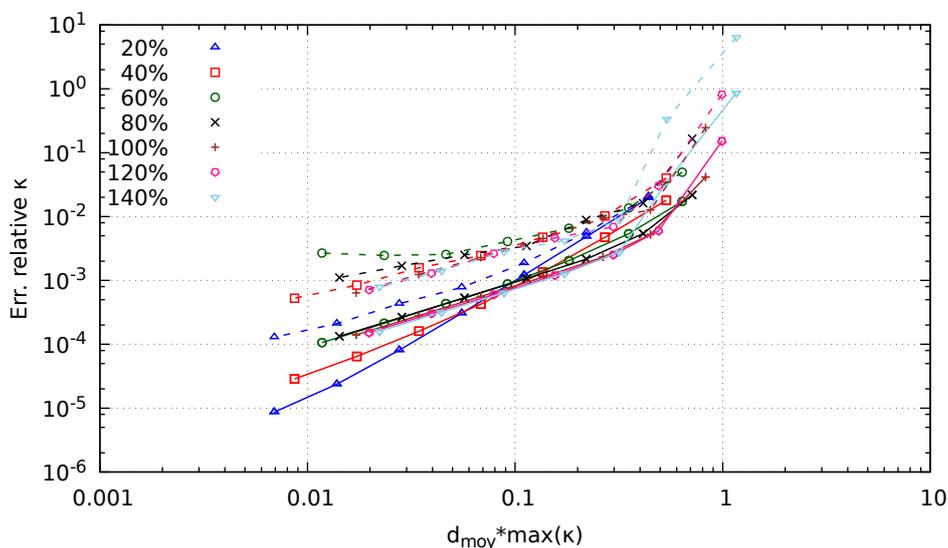
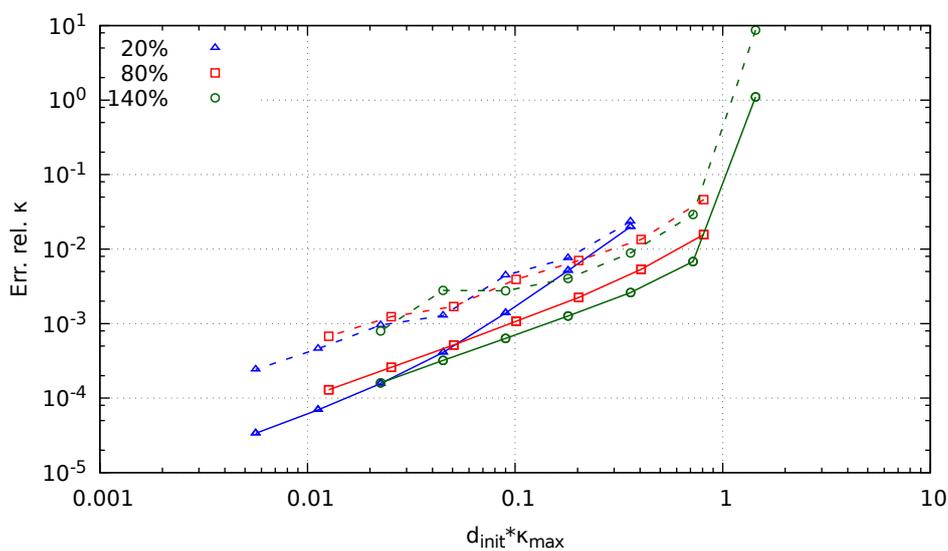
(a) Perturbation $p = 0\%$ (b) Perturbation $p = 20\%$ (c) Perturbation $p = 40\%$

FIGURE E.4 – Influence de la perturbation - Erreurs relatives en norme L_2 (trait continu) et L_∞ (tiret) sur la densité surfacique de courbure d'une famille d'ellipsoïdes, à paramètre $N = 1$, avec la méthode $\text{SR-}\mathcal{N}_1\text{-}\mathbf{n}_m\text{-}0$.

Annexe F

Calcul exact de la distribution surfacique df_S pour des ellipsoïdes

Cette section présente les différentes étapes pour le calcul exact de la distribution surfacique df_S pour des ellipsoïdes d'étirement α . La construction de ces ellipsoïdes est mentionné dans la section 4.2.2, page 113. Pour des facilités de calcul, l'étirement est effectué ici dans la direction z , avec pour conséquence le nouveau système de coordonnées (F.1) :

$$\bar{x}/r_0 = \begin{cases} x = b \sin(\theta) \cos(\varphi)/r_0 \\ y = b \sin(\theta) \sin(\varphi)/r_0 \\ z = a \cos(\theta)/r_0 \end{cases} \quad (\text{F.1})$$

avec a et b le demi-grand axe et le demi-petit axe de l'ellipsoïde vérifiant la relation (F.2)

$$a/r_0 = (1 + \alpha) \quad , \quad b/r_0 = 1/(1 + \alpha)^{1/2} \quad (\text{F.2})$$

Une première étape est la détermination de l'élément différentiel surfacique dA permettant de calculer des surfaces ou portions de surfaces sur une ellipsoïde.

Élément différentiel surfacique dA

L'équation paramétrique de l'ellipsoïde donnée par la relation (F.1) permet grâce aux dérivés partielles en θ et φ de \bar{x} d'aboutir à l'élément différentiel surfacique dA . Nous notons :

$$\bar{x}_\theta = \frac{\partial \bar{x}}{\partial \theta}, \quad \bar{x}_\varphi = \frac{\partial \bar{x}}{\partial \varphi}$$

Ensuite, nous calculons les coefficients E , F et G qui sont les coefficients de la 1^{ère} forme fondamentale associée à l'équation paramétrique (F.1).

$$E = \bar{x}_\theta \cdot \bar{x}_\theta, \quad F = \bar{x}_\theta \cdot \bar{x}_\varphi, \quad G = \bar{x}_\varphi \cdot \bar{x}_\varphi$$

L'élément différentiel surfacique dA est défini par l'équation (F.3).

$$dA = \sqrt{EG - F^2} d\theta d\varphi \quad (\text{F.3})$$

Ce qui nous donne dans ce cas de figure la relation (F.4).

$$dA = b |\sin \theta| \sqrt{a^2 \sin^2 \theta + b^2 \cos^2 \theta} d\theta d\varphi \quad (\text{F.4})$$

Ainsi pour calculer l'aire $A(\theta_1, \theta_2, \varphi_1, \varphi_2)$ d'une surface comprise entre $[\theta_1, \theta_2]$ et $[\varphi_1, \varphi_2]$, il suffit d'intégrer dA sur ce domaine, comme mentionné dans la relation (F.5).

$$A(\theta_1, \theta_2, \varphi_1, \varphi_2) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} b |\sin \theta| \sqrt{a^2 \sin^2 \theta + b^2 \cos^2 \theta} d\theta d\varphi \quad (\text{F.5})$$

Si cette aire peut être évaluée avec un logiciel de calcul formel, il n'en demeure pas moins qu'il faut au préalable déterminer le domaine $[\theta_1, \theta_2] \times [\varphi_1, \varphi_2]$ pour le calcul de la distribution df_S .

Détermination du domaine $[\theta_1, \theta_2] \times [\varphi_1, \varphi_2]$

Dans le calcul de la distribution surfacique df_S , le domaine $[\theta_1, \theta_2] \times [\varphi_1, \varphi_2]$ sur lequel une classe $\hat{\kappa}$ de courbure est définie est connu par les courbures κ au bord de ce domaine. Comme les ellipsoïdes sur lesquels nous travaillons sont de révolution autour de l'axe z , l'intervalle $[\varphi_1, \varphi_2] = [0, 2\pi]$. Seuls θ_1 et θ_2 servent à délimiter la classe $\hat{\kappa}$ de courbure. Ainsi le problème est le suivant : connaissant les courbures $\kappa(\theta_1)$ et $\kappa(\theta_2)$, quelles sont les valeurs de θ_1 et θ_2 ?

Dans un premier temps, voyons comment est calculée la courbure κ . Avec les conventions utilisées dans la relation (F.1), la courbure moyenne κ et la courbure de Gauss κ_G sont évaluées avec le système d'équation (F.6).

$$\begin{cases} R &= (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \\ H &= (x^2/b^4 + y^2/b^4 + z^2/a^4)^{-1/2} \\ \kappa &= H^3 (2b^2 + a^2 - R^2) / (2b^4 a^2) \\ \kappa_G &= H^4 / (b^4 a^2) \end{cases} \quad (\text{F.6})$$

A partir de la courbure de Gauss κ_G

Soit κ_G^0 une courbure de Gauss donnée. Nous cherchons $\theta \in [0, \pi]$ tel que $\kappa_G(\theta) = \kappa_G^0$, avec :

$$\kappa_G(\theta) = \frac{a^2}{[(a^2 - b^2) \sin^2 \theta + b^2]^2} \quad (\text{F.7})$$

Les solutions qui nous intéressent sont celles comprises dans $[0, \pi]$, plus précisément $[0, \pi/2]$ car celles dans l'intervalle $[\pi/2, \pi]$ s'obtiennent par symétrie. La solution de ce problème est donnée la relation (F.8).

$$\theta = \arcsin \left(\left[\frac{\sqrt{a^2/\kappa_G^0 - b^2}}{a^2 - b^2} \right]^{1/2} \right) \quad (\text{F.8})$$

A partir de la courbure moyenne κ

Soit κ^0 une courbure moyenne donnée. Pour les mêmes raisons que précédemment, nous cherchons $\theta \in [0, \pi/2]$ tel que $\kappa(\theta) = \kappa^0$, avec :

$$\kappa(\theta) = \frac{a[(a^2 - b^2) \sin^2 \theta + 2b^2]}{2b [(a^2 - b^2) \sin^2 \theta + b^2]^{3/2}} \quad (\text{F.9})$$

Rappelons que $ab^2 = r_0^3$ (voir Eq. F.2). Cela revient à résoudre l'équation (F.10).

$$-2b\kappa^0 [(a^2 - b^2) \sin^2 \theta + b^2]^{3/2} + (a^3 - r_0^3) \sin^2 \theta + 2r_0^3 = 0 \quad (\text{F.10})$$

Notons $X = \sin^2 \theta$, $P(X) = -2b\kappa^0 [(a^2 - b^2)X + b^2]^{3/2} + (a^3 - r_0^3)X + 2r_0^3$ et X_0 la solution de $P(X) = 0$. Alors la solution de (F.10) est :

$$\theta = \arcsin(X_0^{1/2}) \quad (\text{F.11})$$

Bibliographie

- [1] T. ABADIE, J. AUBIN et D. LEGENDRE. “On the combined effects of surface tension force calculation and interface advection on spurious currents within Volume of Fluid and Level Set frameworks”. In : *J. Comput. Phys.* 297 (2015), p. 611-636 (cf. p. [34](#), [35](#)).
- [2] J. ADELSBERGER, S. GROSS, M. KLITZ, A. RÜTTGERS et M. GRIEBEL. “3D Incompressible two-phase flow benchmark computations for rising droplets”. In : *11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI), 5th European Conference on Computational Mechanics (ECCM V), 6th European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD VI)*. Sous la dir. d’E. ÖNATE, J. OLIVER et A. HUERTA. 2013 (cf. p. [138](#), [141](#)).
- [3] H. T. AHN et M. SHASHKOV. “Multi-material interface reconstruction on generalized polyhedral meshes”. In : *J. Comput. Phys.* 226 (2007), p. 2096-2132 (cf. p. [27](#)).
- [4] S. L. ANNA. “Droplets and Bubbles in Microfluidic Devices”. In : *Annu. Rev. Fluid Mech.* 48 (2016), p. 285-309 (cf. p. [20](#), [21](#)).
- [5] M. ATAEL, M. BUSSMANN, V. SHAAYEGAN, F. COSTA, S. HAN et C. B. PARK. “NPLIC : A machine learning approach to piecewise linear interface construction”. In : *Computers and Fluids* 223 (2021), p. 104950 (cf. p. [27](#)).
- [6] E. AULISA, S. M. and R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI. “Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional Cartesian geometry”. In : *J. Comput. Phys.* 225 (2007), p. 2301-2319 (cf. p. [27](#)).
- [7] E. BABINSKY et P. SOJKA. “Modeling drop size distributions”. In : *Prog. Energy Combust. Sci.* 28 (2002), p. 303-329 (cf. p. [20](#)).
- [8] S. BALACHANDAR et J. K. EATON. “Turbulent Dispersed Multiphase Flow”. In : *Annu. Rev. Fluid Mech.* 42 (2010), p. 111-133 (cf. p. [20](#)).
- [9] D. BHAGA et M. E. WEBER. “Bubbles in viscous liquids : shapes, wakes and velocities”. In : *J. Fluid Mech.* 105 (1981), p. 61-85 (cf. p. [126](#)).
- [10] J. BRACKBILL, D. KOTHE et C. ZEMACH. “A continuum method for modeling surface tension”. In : *J. Comput. Phys.* 100.2 (1992), p. 335-354 (cf. p. [31](#), [32](#), [73](#)).
- [11] N. BREMOND et E. VILLERMAUX. “Atomization by jet impact”. In : *J. Fluid Mech.* 549 (2006), p. 273-306 (cf. p. [20](#)).
- [12] C. E. BRENNEN. *Fundamentals of Multiphase Flows*. Cambridge University Press, 2005 (cf. p. [21](#)).
- [13] R. CANU, S. PUGGELLI, M. ESSADKI, B. DURET, T. MÉNARD, M. MASSOT, J. REVEILLON et F. DEMOULIN. “Where does the droplet size distribution come from ?” In : *Int. J. Multiphase Flow* 107 (2018), p. 230-245 (cf. p. [36](#), [72](#), [73](#)).
- [14] F. CAZALS et M. POUGET. “Estimating differential quantities using polynomial fitting of osculating jets”. In : *Comput. Aided Geom. Des.* 22.2 (2005), p. 121-146 (cf. p. [97](#)).

- [15] S. CHANDRA et C. T. AVEDISIAN. “On the Collision of a Droplet with a Solid Surface”. In : *Proceedings : Mathematical and Physical Sciences* 432.1884 (jan. 1991), p. 13-41 (cf. p. 21).
- [16] P.-C. CHEN, W.-C. WANG, W. L. ROBERTS et T. FANG. “Spray and atomization of diesel fuel and its alternatives from a single-hole injector using a common rail fuel injection system”. In : *Fuel* 103 (2013), p. 850-861 (cf. p. 21).
- [17] R. CLIFT, J. R. GRACE et M. E. WEBER. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, 1978 (cf. p. 126, 146).
- [18] G. COMPÈRE, E. MARCHANDISE et J.-F. REMACLE. “Transient adaptivity applied to two-phase incompressible flows”. In : *J. Comput. Phys.* 227 (2008), p. 1923-1942 (cf. p. 23).
- [19] M. CUTFORTH, P. T. BARTON et N. NIKIFORAKIS. “An efficient moment-of-fluid interface tracking method”. In : *Computers and Fluids* 224 (2021), p. 104964 (cf. p. 27).
- [20] M. DAI et D. P. SCHMIDT. “Adaptive tetrahedral meshing in free-surface flow”. In : *J. Comput. Phys.* 208 (2005), p. 228-252 (cf. p. 23).
- [21] J. DELHAYE. “Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 1.3 (1974), p. 395-409 (cf. p. 23, 72).
- [22] F. DEMOULIN, P. BEAU, G. BLOKKEEL, A. MURA et R. BORGHI. “A new model for turbulent flows with large density fluctuations : Application to liquid atomization”. In : *Atomization and Sprays* 17 (2007), p. 315-345 (cf. p. 73).
- [23] M. DESBRUN, M. MEYER, P. SCHRODER et A. BARR. “Implicit fairing of irregular meshes using diffusion and curvature flow.” In : *SIGGRAPH99*. 1999, p. 317-324 (cf. p. 75).
- [24] S.-H. DONG. “Comment on ‘A single-sum expression for the overlap integral of two associated Legendre polynomials’”. In : *J. Phys. A : Math. Gen.* 35 (2002), p. 4187-4188 (cf. p. 146).
- [25] S.-H. DONG et R. LEMUS. “The Overlap Integral of Three Associated Legendre Polynomials”. In : *Appl. Math. Lett.* 15 (2002), p. 541-546 (cf. p. 146).
- [26] J. DU, B. FIX, J. GLIMM, X. JIA, X. LI, Y. LI et L. WU. “A simple package for front tracking”. In : *J. Comput. Phys.* 213 (2006), p. 613-628 (cf. p. 29, 33, 73, 78, 79, 83, 85, 90, 92, 107, 161, 163).
- [27] L. DUCHEMIN, S. POPINET, C. JOSSERAND et S. ZALESKI. “Jet formation in bubbles bursting at a free surface”. In : *Phys. Fluids* 14.9 (sept. 2002), p. 3000 (cf. p. 19).
- [28] C. DUMOUCHEL. “On the experimental investigation on primary atomization of liquid streams”. In : *Exp. Fluids* 45 (2008), p. 371-422 (cf. p. 20).
- [29] V. DYADECHKO et M. SHASHKOV. “Moment-of-fluid interface reconstruction”. In : *Tech. Rep. LA-UR-05-7571* (2005) (cf. p. 27).
- [30] D. ENRIGHT, F. LOSASSO et R. FEDKIW. “A Fast and Accurate Semi-Lagrangian Particle Level Set Method”. In : *Computers & Structures* 83.6 (fév. 2005), p. 479-490 (cf. p. 50, 63, 64, 145).
- [31] M. ESSADKI. “Contribution to a unified Eulerian modeling of fuel injection : from dense liquid to polydisperse evaporating spray.” Thèse de doct. Université Paris-Saclay, 2018 (cf. p. 75, 76, 81).
- [32] M. FEBRES et D. LEGENDRE. “Enhancement of a 2D front-tracking algorithm with a non-uniform distribution of Lagrangian markers”. In : *J. Comput. Phys.* 358 (2018), p. 173-200 (cf. p. 34, 36).

- [33] M. FEBRES et D. LEGENDRE. “Enhancement of a 2D front-tracking algorithm with a non-uniform distribution of Lagrangian markers”. In : *J. Comput. Phys.* 358 (2018), p. 173-200 (cf. p. 55).
- [34] R. FEDKIW, T. ASLAM, B. MERRIMAN et S. OSHER. “A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multi-material flows (the Ghost Fluid method)”. In : *J. Comput. Phys.* 152 (1999). Sous la dir. de J. of COMPUTATIONAL PHYSICS, p. 457-492 (cf. p. 30, 73).
- [35] D. FUSTER, G. AGBAGLAH, C. JOSSERAND, S. POPINET et S. ZALESKI. “Numerical simulation of droplets, bubbles and waves : state of the art”. In : *Fluid Dyn. Res.* 41 (2009), p. 065001 (cf. p. 20).
- [36] D. E. FYFE, E. S. ORAN et M. J. FRITTS. “Surface Tension and Viscosity with Lagrangian Hydrodynamics on a Triangular Mesh”. In : *J. Comput. Phys.* 76 (1988), p. 349-384 (cf. p. 23).
- [37] S. GANESAN et L. TOBISKA. “An accurate finite element scheme with moving meshes for computing 3D-axisymmetric interface flows”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 57 (2008), p. 119-138 (cf. p. 23).
- [38] S. GANESAN et L. TOBISKA. “Arbitrary Lagrangian-Eulerian finite-element method for computation of two-phase flows with soluble surfactants”. In : *J. Comput. Phys.* 231 (2012), p. 3685-3702 (cf. p. 23).
- [39] F. GIBOU, R. FEDKIW et S. OSHER. “A review of level-set methods and some recent applications”. In : *J. Comput. Phys.* 353 (2018), p. 82-109 (cf. p. 28).
- [40] J. GLIMM, M. GRAHAM, J. GROVE, X. LI, T. SMITH, D. TAN, F. TANGERMAN et Q. ZHANG. “Front tracking in two and three dimensions”. In : *Computers & Mathematics with Applications* 35.7 (1998). Advanced Computing on Intel Architectures, p. 1-11 (cf. p. 28).
- [41] J. GLIMM, X. LI, Y. LIU, Z. XU et N. ZHAO. “Conservative Front Tracking with Improved Accuracy”. In : *SIAM J. Numer. Anal.* 41.5 (2003), p. 1926-1947 (cf. p. 29).
- [42] J. GLIMM, J. W. GROVE, X. L. LI et D. C. TAN. “Robust Computational Algorithms for Dynamic Interface Tracking in Three Dimensions”. In : *SIAM J. Sci. Comput.* 21.6 (2000), p. 2240-2256 (cf. p. 29).
- [43] J. GLIMM, J. W. GROVE, X. L. LI, K.-M. SHYUE, Y. ZENG et Q. ZHANG. “Three-dimensional front tracking”. In : *SIAM J. Sci. Comput.* 19.3 (1998), p. 703-727 (cf. p. 28).
- [44] J. P. GOIS, A. NAKANO, L. G. NONATO et G. C. BUSCAGLIA. “Front tracking with moving-least-squares surfaces”. In : *J. Comput. Phys.* 227 (2008), p. 9643-9669 (cf. p. 63).
- [45] R. GOLDMAN. “Curvature formulas for implicit curves and surfaces”. In : *Comput. Aided Geom. Des.* 22 (2005), p. 632-658 (cf. p. 34, 78, 79).
- [46] S. GONG, W. MA et H. GU. “An experimental investigation on bubble dynamics and boiling crisis in liquid films”. In : *Int. J. Heat Mass Transfer* 79 (2014), p. 694-703 (cf. p. 21).
- [47] M. GOROKHOVSKI et M. HERRMANN. “Modeling Primary Atomization”. In : *Annual Review of Fluid Mechanics* 40 (2008), p. 343-366 (cf. p. 20).
- [48] R. GUILLAUMENT, S. VINCENT et J.-P. CALTAGIRONE. “An original algorithm for VOF based method to handle wetting effect in multiphase flow simulation”. In : *Mech. Res. Commun.* 63 (2015), p. 26-32 (cf. p. 27).
- [49] M. HERRMANN. “Detailed Numerical Simulations of the Primary Atomization of a Turbulent Liquid Jet in Crossflow”. In : *J. Eng. Gas Turbines Power* 132 (juin 2010), p. 061506 (cf. p. 20).

- [50] C. W. HIRT et B. D. NICHOLS. “Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries”. In : *J. Comput. Phys.* 39 (1981), p. 201-225 (cf. p. 26).
- [51] S. HYSING, S. TUREK, D. KUZMIN, N. PAROLINI, E. BURMAN, S. GANESAN et L. TOBISKA. “Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 60.11 (2009), p. 1259-1288 (cf. p. 138, 141, 146).
- [52] M. JEMISON, M. SUSSMAN et M. SHASHKOV. “Filament capturing with the Multimaterial Moment-of-Fluid method”. In : *J. Comput. Phys.* 28 (2015), p. 149-172 (cf. p. 27).
- [53] D. JURIC et G. TRYGGVASON. “Computations of boiling flows”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 24.3 (1998), p. 387-410 (cf. p. 28).
- [54] I. KATAOKA. “Local instant formulation of two-phase flow”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 12.5 (1986), p. 745-758 (cf. p. 24).
- [55] S. KESHANI, W. R. W. DAUD, M. NOUROUZI, F. NAMVAR et M. GHASEMI. “Spray drying : An overview on wall deposition, process and modeling”. In : *J. Food Eng.* 146 (2015), p. 152-162 (cf. p. 21).
- [56] D.-A. KOFFI BI, M. TAVARES, E. CHENIER et S. VINCENT. “Accuracy and convergence of the curvature and normal vector discretizations for 3D static and dynamic front-tracking interfaces”. In : *submitted in J. Comput. Phys.* (2021) (cf. p. 37).
- [57] D.-A. KOFFI BI, M. TAVARES, É. CHÉNIER et S. VINCENT. “A Review of Geometrical Interface Properties for 3D Front-Tracking Methods”. In : *Turbulence and Interactions*. Sous la dir. de M. DEVILLE, C. CALVIN, V. COUAILLIER, M. DE LA LLAVE PLATA, J.-L. ESTIVALÈZES, T. H. LÊ et S. VINCENT. Cham : Springer International Publishing, 2021, p. 144-149 (cf. p. 37).
- [58] M. KUCHARIK, R. V. GARIMELLA, S. P. SCHOFIELD et M. J. SHASHKOV. “A comparative study of interface reconstruction methods for multi-material ALE simulations”. In : *J. Comput. Phys.* 229 (2010), p. 2432-2452 (cf. p. 27).
- [59] KUPRAT, ANDREW, KHAMAYSEH, AHMED, GEORGE, DENISE, LARKEY et LEVI. “Volume Conserving Smoothing for Piecewise Linear Curves, Surfaces, and Triple Lines”. In : *J. Comput. Phys.* 172.1 (sept. 2001), p. 99-118 (cf. p. 60).
- [60] T. LANGRISH et D. FLETCHER. “Spray drying of food ingredients and applications of CFD in spray drying”. In : *Chem. Eng. Process.* 40 (2001), p. 345-354 (cf. p. 21).
- [61] J. C. LASHERAS, E. VILLERMAUX et E. J. HOPFINGER. “Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet”. In : *J. Fluid Mech.* 357 (1998), p. 351-379 (cf. p. 20).
- [62] R. LEBAS, T. MENARD, P. BEAU, A. BERLEMONT et F. DEMOULIN. “Numerical simulation of primary break-up and atomization : DNS and modelling study”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 35 (2009), p. 247-260 (cf. p. 20, 30).
- [63] A. H. LEFEBVRE et V. G. MCDONELL. *Atomization and Sprays*. Second. Combustion : An International Series. CRC Press, 2017 (cf. p. 21).
- [64] D. LEGENDRE et J. MAGNAUDET. “The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow”. In : *J. Fluid Mech.* 368 (1998), p. 81-126 (cf. p. 23).
- [65] R. J. LEVEQUE. “High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flows”. In : *SIAM J. Numer. Anal.* 33.2 (avr. 1996), p. 627-665 (cf. p. 50, 63, 145).
- [66] H. LHUISSIER et E. VILLERMAUX. “Bursting bubble aerosols”. In : *J. Fluid Mech.* 696 (2012), p. 5-44 (cf. p. 19).
- [67] X. LI, G. XU et Y. J. ZHANG. “Localized discrete Laplace-Beltrami operator over triangular mesh”. In : *Computer Aided Geometric Design*. T. 39. 2015, p. 67-82 (cf. p. 73, 80, 88).

- [68] K. LUO, H. PITSCH, M. PAI et O. DESJARDINS. “Direct numerical simulations and analysis of three-dimensional n-heptane spray flames in a model swirl combustor”. In : *Proc. Combust. Inst.* 33 (2011), p. 2143-2152 (cf. p. 21).
- [69] J. MAGNAUDET. *Méthodes numériques pour les problèmes d’interfaces*. Lalonde les Maures : Ecole de Printemps, mai 1997 (cf. p. 24).
- [70] P. MARMOTTANT et E. VILLERMAUX. “On spray formation”. In : *J. Fluid Mech.* 498 (2004), p. 73-111 (cf. p. 20).
- [71] H. A. MAVROMATIS. “A single-sum expression for the overlap of two associated Legendre polynomials”. In : *J. Phys. A : Math. Gen.* 32 (1999), p. 2601-2603 (cf. p. 146).
- [72] H. A. MAVROMATIS et R. S. ALASSAR. “A Generalized Formula for the Integral of Three Associated Legendre Polynomials”. In : *Appl. Math. Lett.* 12 (1999), p. 101-105 (cf. p. 146).
- [73] N. MAX. “Weights for computing vertex normals from facets normals.” In : *Journal of Graphics Tools* 4.2 (1999), p. 1-6 (cf. p. 79).
- [74] R. MCDERMOTT et S. POPE. “The parabolic edge reconstruction method (PERM) for Lagrangian particle advection”. In : *J. Comput. Phys.* 227.11 (2008), p. 5447-5491 (cf. p. 49, 89, 92, 94).
- [75] T. MÉNARD, S. TANGUY et A. BERLEMONT. “Coupling level set/VOF/ghost fluid methods : Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 33 (2007), p. 510-524 (cf. p. 30).
- [76] M. MEYER, M. DESBRUN, P. SCHRODER et A. H. BARR. “Discrete Differential-Geometry Operators for Triangulated 2-Manifolds”. In : *Visualization and Mathematics III*. Sous la dir. de H.-C. HEGE et K. POLTHIER. Springer, 2003, p. 35-57 (cf. p. 33, 36, 75, 76, 81, 85, 90, 92, 107, 152, 154).
- [77] E. MOHAMED, D. FLORENCE, de CHAISEMARTIN STÉPHANE, L. ADAM, M. THIBAUT et M. MARC. “Statistical modeling of the gas–liquid interface using geometrical variables : Toward a unified description of the disperse and separated phase flows”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 120 (2019), p. 103084 (cf. p. 36, 73).
- [78] L. MORAWSKA, G. JOHNSON, Z. RISTOVSKI, M. HARGREAVES, K. MENGERSEN, S. C. B, C. CHAO, Y. LI et D. KATOSHEVSKI. “Size distribution and sites of origin of droplets expelled from the human respiratory tract during expiratory activities”. In : *Aerosol Science* 40.3 (2009), p. 256-269 (cf. p. 21).
- [79] C. MUNDO, M. SOMMERFELD et C. TROPEA. “Droplet-wall collisions : Experimental studies of the deformation and breakup process”. In : *Int. J. Multiphase Flow* 21.2 (1995), p. 151-173 (cf. p. 21).
- [80] N. NIKOLOPOULOS, A. THEODORAKAKOS et G. BERGELES. “A numerical investigation of the evaporation process of a liquid droplet impinging onto a hot substrate”. In : *Int. J. Heat Mass Transfer* 50 (2007), p. 303-319 (cf. p. 21).
- [81] W. F. NOH et P. WOODWARD. “SLIC (Simple line interface calculation)”. In : *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28 – July 2, 1976 Twente University, Enschede*. Sous la dir. d’A. I. van de VOOREN et P. J. ZANDBERGEN. T. 59. Lecture Notes in Physics. Berlin, Heidelberg : Springer, Berlin, Heidelberg, juil. 1976 (cf. p. 26).
- [82] S. NUKIYAMA. “The maximum and minimum values of the heat Q transmitted from metal to boiling water under atmospheric pressure.” In : *Int. J. Heat Mass Transfer* 9 (1966), p. 1419-1433 (cf. p. 21).
- [83] E. OLSSON et G. KREISS. “A conservative level set method for two phase flow”. In : *J. Comput. Phys.* 210 (2005), p. 225-246 (cf. p. 28).

- [84] E. OLSSON, G. KREISS et S. ZAHEDI. “A conservative level set method for two phase flow II”. In : *J. Comput. Phys.* 225 (2007), p. 785-807 (cf. p. 28).
- [85] S. OSHER et J. A. SETHIAN. “Front Propagating with curvature dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations”. In : *J. Comput. Phys.* 79.1 (nov. 1988), p. 12-49 (cf. p. 27).
- [86] A. PAUDEL, Z. A. WORKU, J. MEEUS, S. GUNS et G. V. den MOOTER. “Manufacturing of solid dispersions of poorly water soluble drugs by spray drying : Formulation and process considerations”. In : *Int. J. Pharm.* (2012), p. 12732 (cf. p. 21).
- [87] C. S. PESKIN. “Numerical analysis of blood flow in the heart”. In : *J. Comput. Phys.* 25.3 (1977), p. 220-252 (cf. p. 31).
- [88] M. PEZO et V. STEVANOVIC. “Numerical prediction of critical heat flux in pool boiling with the two-fluid model”. In : *Int. J. Heat Mass Transfer* 54 (2011), p. 3296-3303 (cf. p. 21).
- [89] J. E. PILLIOD. *An Analysis of Piecewise Linear Interface Reconstruction Algorithms for Volume-of-fluid Methods*. Davis : University of California, sept. 1992 (cf. p. 27).
- [90] J. E. PILLIOD et E. G. PUCKETT. “Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces”. In : *J. Comput. Phys.* 199 (2004), p. 465-502 (cf. p. 27).
- [91] K. POLTHIER, J. HASS, D. HOFFMAN, A. JAFFE, H. ROSENBERG, R. SCHOEN et M. WOLF. “Computational aspects of discrete minimal surfaces.” In : *Proc. of the Clay Summer school on Global Theory of Minimal Surfaces*. 2002 (cf. p. 75).
- [92] S. POPINET. “An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows”. In : *J. Comput. Phys.* 228.16 (2009), p. 5838-5866 (cf. p. 34-36).
- [93] S. POPINET. “Numerical Models of Surface Tension”. In : *Annu. Rev. Fluid Mech.* 50.1 (2018), p. 49-75 (cf. p. 31, 32, 35).
- [94] S. POPINET et S. ZALESKI. “A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension.” In : *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 30 (1999), p. 775-793 (cf. p. 76, 78).
- [95] H. POTTMANN, J. WALLNER, Y.-L. YANG, Y.-K. LAI et S.-M. HU. “Principal curvatures from the integral invariant viewpoint”. In : *Comput. Aided Geom. Des.* 24.8 (2007). *Discrete Differential Geometry*, p. 428-442 (cf. p. 97).
- [96] E. G. PUCKETT. “A volume-of-fluid interface tracking algorithm with applications to computing shock wave refraction”. In : *Proceedings of the Fourth International Symposium on Computational Fluid Dynamics*. Sous la dir. de H. DWYER. Davis, CA, 1991, p. 933-938 (cf. p. 27).
- [97] G. RACAH. “Theory of Complex Spectra. II”. In : *Phys. Rev.* 62 (nov. 1942), p. 438-462 (cf. p. 146).
- [98] Y. RENARDY et M. RENARDY. “PROST : A Parabolic Reconstruction of Surface Tension for the Volume-of-Fluid Method”. In : *J. Comput. Phys.* 183 (2002), p. 400-421 (cf. p. 34).
- [99] I. ROGHAIR, V. S. ANNALAND et J. KUIPERS. “An improved Front-Tracking technique for the simulation of mass transfer in dense bubbly flows”. In : *Chem. Eng. Sci.* 152 (oct. 2016), p. 351-369 (cf. p. 50, 55, 59, 89).
- [100] S. RUSINKIEWICZ. “Estimating curvatures and their derivatives on triangle meshes”. In : *Proceedings. 2nd International Symposium on 3D Data Processing, Visualization and Transmission, 2004. 3DPVT 2004*. 2004, p. 486-493 (cf. p. 97).
- [101] M. SATO. “General formula of the Racah coefficient”. In : *Progress of Theoretical Physics* 13.4 (avr. 1955) (cf. p. 146).
- [102] S. SAZHIN. *Droplets and Sprays*. Springer, 2014 (cf. p. 20).

- [103] R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI. “Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian-Lagrangian advection”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 41 (2003), p. 251-274 (cf. p. 27).
- [104] SCARDOVELLI et ZALESKI. “Direct Numerical Simulation of free-surface and interfacial flow”. In : *Annu. Rev. Fluid Mech.* 31 (jan. 1999), p. 567-603 (cf. p. 32).
- [105] D. SÉBILLEAU. “On the computation of the integrated products of three spherical harmonics”. In : *J. Phys. A : Math. Gen.* 31.34 (août 1998), p. 7157-7168 (cf. p. 146).
- [106] S. SHIN. “Computation of the curvature field in numerical simulation of multiphase flow”. In : *J. Comput. Phys.* 222.2 (2007), p. 872-878 (cf. p. 32).
- [107] S. SHIN, S. I. ABDEL-KHALIK, V. DARU et D. JURIC. “Accurate representation of surface tension using the level contour reconstruction method”. In : *J. Comput. Phys.* 203 (2005), p. 493-516 (cf. p. 29, 32).
- [108] S. SHIN et D. JURIC. “Modeling Three-Dimensional Multiphase Flow Using a Level Contour Reconstruction Method for Front Tracking without Connectivity”. In : *J. Comput. Phys.* 180.2 (2002), p. 427-470 (cf. p. 29, 73).
- [109] S. SHIN et D. JURIC. “A hybrid interface method for three-dimensional multiphase flows based on front tracking and level set techniques”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 60.7 (2009), p. 753-778 (cf. p. 32).
- [110] S. SHIN, I. YOON et D. JURIC. “The Local Front Reconstruction Method for direct simulation of two- and three-dimensional multiphase flows”. In : *J. Comput. Phys.* 230.17 (2011), p. 6605-6646 (cf. p. 29).
- [111] L. SHUI, J. C. EIJKEL et A. van den BERG. “Multiphase flow in microfluidic systems – Control and applications of droplets and interfaces”. In : *Adv. Colloid Interface Sci.* 133 (2007), p. 35-49 (cf. p. 21).
- [112] S. SOM et S. AGGARWAL. “Effects of primary breakup modeling on spray and combustion characteristics of compression ignition engines”. In : *Combust. Flame* 157 (2010), p. 1179-1193 (cf. p. 21).
- [113] D. SUN et W. TAO. “A coupled volume-of-fluid and level set (VOSET) method for computing incompressible two-phase flows”. In : *Int. J. Heat Mass Transfer* 53 (2010), p. 645-655 (cf. p. 30).
- [114] M. SUSSMAN et E. G. PUCKETT. “A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3D and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows”. In : *J. Comput. Phys.* 162 (2000), p. 301-337 (cf. p. 29).
- [115] M. SUSSMAN, P. SMEREKA et S. OSHER. “A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow”. In : *J. Comput. Phys.* 114 (1994), p. 146-159 (cf. p. 28).
- [116] G. TAUBIN. “A signal processing approach to fair surface design.” In : *SIGGRAPH '95*. 1995, p. 351-358 (cf. p. 75).
- [117] M. TAVARES. “Simulation et modélisation multi-échelle d’écoulements diphasiques”. Thèse de doct. Université Paris-Est, juin 2019 (cf. p. 30, 34, 36).
- [118] M. TAVARES, D.-A. KOFFI BI, E. CHENIER et S. VINCENT. “A Two-Dimensional Second Order Conservative Front-Tracking Method with an Original Marker Advection Approach Based on Jump Relations”. In : *Communications in Computational Physics* 27.5 (2020), p. 1550-1589 (cf. p. 37, 45).

- [119] M. TAVARES, D.-A. KOFFI BI, E. CHÉNIER et S. VINCENT. “A Front-Tracking Method for Multiphase Flows with a Sharp Interface Representation”. In : *Turbulence and Interactions*. Sous la dir. de M. DEVILLE, C. CALVIN, V. COUAILLIER, M. DE LA LLAVE PLATA, J.-L. ESTIVALÈZES, T. H. LÊ et S. VINCENT. Cham : Springer International Publishing, 2021, p. 189-195 (cf. p. 37).
- [120] D. J. TORRES et J. U. BRACKBILL. “The Point-Set Method : Front-Tracking without Connectivity”. In : *J. Comput. Phys.* 165 (2000), p. 620-644 (cf. p. 29, 30, 47).
- [121] P. TRONTIN, S. VINCENT, J. ESTIVALEZES et J. CALTAGIRONE. “A subgrid computation of the curvature by a particle/level-set method. Application to a front-tracking/ghost-fluid method for incompressible flows”. In : *J. Comput. Phys.* 231.20 (2012), p. 6990-7010 (cf. p. 78).
- [122] G. TRYGGVASON, B. BUNNER, A. ESMAEELI, D. JURIC, N. AL-RAWAHI, W. TAUBER, J. HAN, S. NAS et Y.-J. JAN. “A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow”. In : *J. Comput. Phys.* 169.2 (2001), p. 708-759 (cf. p. 29-31, 76, 77).
- [123] G. TRYGGVASON, R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI. *Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows*. 1^{re} éd. Cambridge University Press, 2011 (cf. p. 31, 77, 82, 85, 90, 93, 95, 107).
- [124] S. O. UNVERDI et G. TRYGGVASON. “A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows”. In : *J. Comput. Phys.* 100.1 (1992), p. 25-37 (cf. p. 28).
- [125] G. VAUDOR, T. MÉNARD, W. ANISZEWSKI, M. DORING et A. BERLEMONT. “A consistent mass and momentum flux computation method for two phase flows. Application to atomization process”. In : *Computers and Fluids* 152 (2017), p. 204-216 (cf. p. 73).
- [126] E. VILLERMAUX. “Fragmentation”. In : *Annu. Rev. Fluid Mech.* 39 (2007), p. 419-446 (cf. p. 19).
- [127] E. VILLERMAUX et B. BOSSA. “Drop fragmentation on impact”. In : *J. Fluid Mech.* 668 (2011), p. 412-435 (cf. p. 21).
- [128] M. WARDETZKY. “Convergence of the Cotangent Formula : An Overview”. In : *Discrete Differential Geometry* 38 (2008), p. 275-286 (cf. p. 88).
- [129] S. WILDEMAN, C. W. VISSER, C. SUN et D. LOHSE. “On the spreading of impacting drops”. In : *J. Fluid Mech.* 805 (2016), p. 636-655 (cf. p. 21).
- [130] F. XIAO, Y. HONMA et T. KONO. “A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function”. In : *Int. J. Numer. Methods Fluids* 48 (2005), p. 1023-1040 (cf. p. 27).
- [131] F. XIAO, S. LI et C. CHEN. “Revisit to the THINC scheme : A simple algebraic VOF algorithm”. In : *J. Comput. Phys.* 230 (2011), p. 7086-7092 (cf. p. 27).
- [132] G. XU. “Discrete Laplace–Beltrami operators and their convergence”. In : *Comput. Aided Geom. Des.* 21.8 (2004). Geometric Modeling and Processing 2004, p. 767-784 (cf. p. 88).
- [133] Y.-L. XU. “Fast evaluation of the Gaunt coefficients”. In : *Math. Comput.* 65.216 (oct. 1996), p. 1601-1612 (cf. p. 146).
- [134] Y.-L. XU. “Fast evaluation of Gaunt coefficients : recursive approach”. In : *J. Comput. Appl. Math.* 85 (1997), p. 53-65 (cf. p. 146).
- [135] D. L. YOUNGS. “Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion.” In : *Numerical methods for Fluid Dynamics* 24(2) (1982), p. 273-285 (cf. p. 26).
- [136] D.-h. YU. *Natural Boundary Integral Method and Its Applications*. T. 539. Mathematics and Its Applications. Springer Netherlands, 2002 (cf. p. 73).

- [137] D. ZHAO, Y. TOBA, Y. SUZUKI et S. KOMORI. “Effect of wind waves on air–sea gas exchange : proposal of an overall CO₂ transfer velocity formula as a function of breaking-wave parameter”. In : *Tellus* (2003), p. 478-487 (cf. p. 19).
- [138] A. Z. ZINCHENKO, M. A. ROTHER et R. H. DAVIS. “A novel boundary-integral algorithm for viscous interaction of deformable drops.” In : *Phys. Fluids* 9 (1997) (cf. p. 78, 79, 83).
- [139] D. ZUZIO, J.-L. ESTIVALEZES, P. VILLEDIEU et G. BLANCHARD. “Numerical simulation of primary and secondary atomization”. In : *Comptes Rendus Mécanique* 341 (2013), p. 15-25 (cf. p. 73).