Les méthodes de simulation des systèmes fluides avec interfaces

Cécile APPERT

Chargée de Recherche 2nde Classe au CNRS

Laboratoire de Physique Statistique, CNRS URA 1306,
École Normale Supérieure
24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France

27 Décembre 1994

Résumé

Deux grandes familles de méthodes permettent de simuler des écoulements en présence d'interfaces. Les méthodes dites de suivi d'interface utilisent des marqueurs qui se déplacent avec le fluide. A chaque pas de temps, l'interface peut être reconstruite à partir de la position des marqueurs. Ces méthodes, précises au second ordre, ne peuvent s'appliquer que pour un petit nombre d'interfaces. Les méthodes dites de capture d'interface ont recours à un marquage en volume. Elles s'adaptent à des topologies compliquées. Peu précises au départ, elles se sont considérablement améliorées au cours des dernières années. Parallèlement à ces méthodes, l'approche dite de Boltzmann s'est développée à partir de la méthode particulaire des gaz sur réseau. Elle est particulièrement adaptée à la programmation sur machine parallèle. Nous mentionnons également des méthodes spécifiques à certains problèmes ou ensembles d'équations. Après la présentation des diverses méthodes, des éléments de comparaison sont apportés. Des exemples d'applications ont été donnés.

Table des matières

1. Introduction

L'importance des écoulements multiphasiques est une évidence. A titre d'exemple, mentionnons l'industrie pétrolière confrontée à la récupération du pétrole dans les gisements, les écoulements à bulles dans les circuits de refroidissement des réacteurs nucléaires, les mélanges de composants lors d'une combustion dans un moteur ou d'une réaction chimique, les phénomènes de cavitation.

L'expérience ne permet pas de répondre à toutes les questions qui se posent. La difficulté de mesurer les forces mises en jeu dans un écoulement ou d'obtenir des interfaces non-polluées sont des exemples de limitations de l'approche expérimentale.

L'approche numérique du multiphasique présente elle aussi des difficultés intrinsèques. Les écoulements multiphasiques posent par principe des problèmes à frontière libre. Les conditions aux limites doivent donc être écrites sur une interface dont on ignore a priori la position. Dans les dernières décennies, des progrès considérables ont été réalisés pour développer des méthodes numériques appropriées. Il n'existe pas de méthode universelle, mais plutôt un ensemble d'approches parmi lesquelles on doit choisir celle qui semble la plus adaptée au problème considéré. L'objet de ce rapport est de dresser un panorama de ces méthodes, en essayant de faire ressortir les domaines de validité de chacune d'entre elles, et les perspectives qui s'ouvrent à ce jour.

Avant toute chose, rappelons quelques généralités sur la représentation des écoulements en mécanique des fluides. Il existe essentiellement deux manières de décrire un écoulement. La première, appelée *représentation eulérienne*, consiste à donner le champ des vitesses, pressions, etc... en tout point à un instant donné:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{t}) \tag{1}$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{t}) \tag{2}$$

On peut dire que la représentation eulérienne donne une photo instantanée de l'écoulement à un instant donné.

Dans la plupart des écoulements, l'évolution des grandeurs eulériennes est donnée par les équations de Navier-Stokes, qui traduisent la conservation de la masse et de la quantité de mouvement:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \tag{3}$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \Delta u_i \tag{4}$$

On peut rajouter une troisième équation de conservation de l'énergie.

L'importance relative des forces d'inertie par rapport aux forces visqueuses est donnée par le nombre de Reynolds $Re = UL/\nu$ où U et L sont une vitesse et une longueur caractéristique de l'écoulement. Lorsque ce nombre sans dimension est grand devant 1, le terme $\nu \Delta u_\alpha$ est négligeable et le système se réduit formellement aux équations dites d'Euler.

Dans la *description lagrangienne* des écoulements, on définit une *particule fluide* comme la matière contenue dans un volume donné, petit à l'échelle de l'écoulement, mais grand à l'échelle moléculaire. On suit le mouvement de ces particules au cours du temps, et l'écoulement est décrit en donnant à chaque instant leur position en fonction de celle de départ:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(x_0, y_0, z_0, t) \tag{5}$$

La représentation lagrangienne est liée à la notion de trajectoire. Elle correspondrait à une photo prise de nuit avec un long temps de pose, où les trajectoires seraient matérialisées par la traînée que laissent les lumières en mouvement.

Ces deux représentations sont bien sûr équivalentes et il est toujours possible de passer de l'une à l'autre. Cependant selon le problème considéré l'une des approches peut s'avérer plus simple que l'autre.

Nous allons commencer par les méthodes de simulation d'écoulements multiphasiques les plus simples, où l'on cherche à se ramener à un écoulement monophasique. Puis seront décrites les grandes familles de méthodes multiphasiques : méthodes de suivi d'interface, de capture de front, de gaz sur réseau et de Boltzmann. La section 6. sera consacrée à des méthodes qui résolvent d'autres équations que Navier-Stokes. La description de chacune des méthodes est suivie par des exemples d'applications. La section 7. développe plus particulièrement certaines d'entre elles. La section 8. contient une comparaison des diverses méthodes et souligne les questions d'actualité. Le lecteur trouvera ensuite une bibliographie sur le sujet, ainsi que la liste de laboratoires impliqués dans ce type de recherche. Ce rapport n'a pas la prétention d'être exhaustif et l'accent y a été mis sur les modèles les mieux connus de l'auteur. Nous espérons néanmoins que cet exposé apportera des points de repère utiles au lecteur.

2. Des modèles à un fluide aux modèles à deux fluides.

Nous présentons dans cette partie quelques méthodes qui prennent en compte le caractère multiphasique de l'écoulement sans pour autant suivre dans le détail le mouvement des diverses phases. Le lecteur uniquement intéressé par les méthodes qui traitent explicitement le mouvement des interfaces pourra se reporter directement à la section suivante.

2.1. Modèle homogène.

Puisque l'on dispose déjà de codes monophasiques, l'idée la plus simple est de se ramener à ce cas en définissant un fluide équivalent au mélange. Cela pourra se faire lorsque l'une des phases est très dispersée dans l'autre, par exemple pour de petites bulles de gaz réparties dans un écoulement liquide.

On définit une masse volumique équivalente pour le mélange

$$\bar{\rho} = \epsilon\rho_v + (1-\epsilon)\rho_l \tag{6}$$

où ϵ est la fraction volumique occupée par la phase vapeur. En supposant que localement les deux phases ont la même vitesse, le problème revient à résoudre les équations habituelles de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour le fluide équivalent.

Les hypothèses sous-jacentes à ce modèle restreignent considérablement son domaine de validité. En particulier, dans le cas général, les deux phases auront des vitesses différentes. Cela sera pris en compte par le modèle dit de mélange ("mixture model") présenté dans la section suivante [1].

2.2. Le modèle de mélange.

Aux équations habituelles du mouvement pour le fluide porteur, on ajoute pour la fraction volumique ϵ de la phase dispersée une équation de conservation de la masse

$$\partial_t \epsilon + \nabla.(\epsilon \mathbf{v}_D) = 0 \tag{7}$$

et une équation de conservation de l'impulsion [2]

$$\begin{aligned} (1+\epsilon\alpha)\left(\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v}.\nabla)\mathbf{v}\right) &= -\nabla p + E\nabla.\left(\mu(\epsilon)\left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T - \frac{2}{3} I \nabla \mathbf{v}\right]\right) \\ & \quad -\nabla.\epsilon(1-\epsilon)\frac{1+\alpha}{1+\epsilon\alpha}\mathbf{v}_R \mathbf{v}_R. \end{aligned} \tag{8}$$

où α est la différence de densité relative, E le nombre d'Eckman qui compare les forces visqueuses et la force de Coriolis, et $\mu(\epsilon)$ le rapport de la viscosité effective du mélange et de celle du fluide porteur. La vitesse relative $\mathbf{v}_R$ est définie comme la différence entre les vitesses moyennes locales de la phase dispersée $\mathbf{v}_D$ et de la phase porteuse $\mathbf{v}_P$.

L'incompressibilité des deux phases s'exprime par

$$\nabla.\mathbf{j} = 0 \tag{9}$$

où $\mathbf{j}$ est le flux volumique moyenné sur les 2 phases.

La vitesse relative $\mathbf{v}_R = \mathbf{v}_D - \mathbf{v}_P$ doit être donnée par une relation supplémentaire. Elle peut par exemple résulter de l'équilibre entre poussée d'Archimède et traînée de Stokes. Une relation constitutive donnant la viscosité effective du mélange doit également être choisie [3].

Des simulations basées sur cette méthode ont été réalisées par Amberg et Ungarish [1] pour étudier l'évolution d'un mélange dilué de deux fluides mis en rotation. La phase dispersée étant supposée plus légère que l'autre, elle s'accumule dans la région centrale, où la pression est plus faible. La comparaison avec les prédictions de la théorie asymptotique tend à confirmer la validité de la méthode pour ce type d'applications.

2.3. Approche lagrangienne.

Au lieu de considérer la fraction volumique moyenne occupée localement par la phase dispersée, il est possible de suivre individuellement chacune des bulles [4]. L'expression de la force de traînée exercée par le fluide environnant sur les bulles doit être déterminée indépendamment. Dans les simulations, on retrouve bien que les bulles s'accumulent dans les régions de basse pression créées par la mise en rotation du fluide [4]. Les expressions utilisées supposent que les bulles sont sphériques (i.e. la tension de surface est élevée) et incompressibles. Leur taille doit être faible devant l'échelle caractéristique de l'écoulement et leur concentration suffisamment faible pour que les interactions entre bulles puissent être négligées.

Des formes de particules fluides plus élaborées peuvent être prises en compte. Szeri et Leal [5] considèrent des particules axisymétriques allongées. L'orientation des particules est décrite par une fonction de distribution dont l'évolution est donnée par une représentation Lagrangienne. On pourrait généraliser en remplaçant l'orientation des particules par une autre caractéristique de la conformation microscopique des particules. L'évolution macroscopique de l'écoulement est quant à elle obtenue par une technique eulérienne standard.

Trapp et Mortensen [6] ont proposé un modèle monodimensionnel permettant d'inclure les interactions entre particules fluides. De nouveau, la phase continue est décrite par des équations eulériennes de conservation de la masse et de l'impulsion tandis qu'une représentation Lagrangienne est adoptée pour les particules. Les fluides considérés sont incompressibles et l'extension spatiale des bulles peut atteindre la taille des mailles utilisées pour résoudre les équations Eulériennes de la phase continue. Le couplage entre les deux phases est effectué en exprimant

(1) que le volume occupé par l'une des phases ne peut pas l'être par l'autre.

(2) qu'une force de traînée est exercée par l'une des phases sur l'autre.

De plus les bulles peuvent fusionner lorsqu'elles rentrent en contact, ou se scinder en plusieurs bulles plus petites. Ces coalescences et ruptures conservent la masse et l'impulsion totales. Comme précédemment, une relation complémentaire est requise pour exprimer l'intensité de la force de traînée. Les auteurs utilisent les formules dûes à Stuhmiller [7] pour déterminer la morphologie des bulles en fonction de leur volume. Les bulles peuvent être sphériques, elliptiques ou cylindriques (bouchon). Comme les équations du mouvement considérées sont monodimensionnelles, la forme des bulles affecte uniquement la force de traînée et le critère de coalescence.

Trapp et Mortensen étudient un écoulement à bulles dans un tuyau vertical, et prédisent de façon satisfaisante l'évolution en fonction du temps de la topologie de l'écoulement, comme cela a pu être montré par une comparaison avec des résultats expérimentaux. Ce modèle, intermédiaire entre le modèle homogène et les modèles à deux fluides de la section suivante, n'est à notre connaissance disponible qu'en une dimension. Son extension à des dimensions d'espace plus élevées n'est pas triviale.

Pour aller plus loin dans l'étude des écoulements à bulles, il est nécessaire d'avoir recours à des modèles explicitement diphasiques [8]. Par exemple Mao et Dukler ont simulé l'ascension de bulles dans des tuyaux verticaux remplis de liquide. Les bulles occupent presque toute la section du tube [9]. Le mouvement du fluide porteur et la déformation des grosses bulles ont été calculés par les auteurs en utilisant une méthode du type de celle que nous décrirons dans la section 3.2. et qui décrit explicitement le mouvement des interfaces. Un tel code multiphasique et un modèle de mélange peuvent être couplés lorsque le fluide, en plus des grosses bulles, charrie des bulles de petites tailles –à condition qu'il existe une séparation nette entre les tailles des deux ensembles de bulles.

3. Suivi d'interfaces dans des modèles à deux fluides.

Dans la plupart des cas, on ne peut se contenter d'une description statistique moyenne de l'écoulement. On a besoin d'une représentation de la position de chacune des phases ou de l'interface qui les sépare [10]. Les méthodes de suivi d'interface suivent l'évolution de l'interface grâce à des marqueurs répartis sur celle-ci. Nous allons maintenant en décrire le principe.

3.1. Suivi d'interface.

Des marqueurs initialement répartis sur l'interface sont advectés avec l'écoulement. A tout instant, l'interface peut être reconstruite à partir de la position des marqueurs grâce à des algorithmes plus ou moins sophistiqués. En général une interpolation par des polynômes cubiques par morceaux est suffisante pour éviter les instabilités [11].

Pour déplacer les marqueurs, on se place dans un système de coordonnées local curviligne [12]. Dans ce repère sont réécrites les lois de conservation eulériennes qui donnent le mouvement du fluide. Celles-ci sont scindées en deux sous-ensembles d'équations correspondant respectivement aux directions normales et tangentielles à l'interface. On résout d'abord les équations dans la direction normale. Le front est déplacé une première fois et les valeurs des variables sur le front sont modifiées. Puis on recommence pour la direction tangentielle à l'interface. Cette décomposition en deux directions est utile du point de vue de la stabilité. Par nature, la propagation tangentielle est plus instable que la propagation normale et nécessite un schéma adapté.

Les marqueurs tendent naturellement à se regrouper dans certaines régions de l'interface et à se raréfier dans d'autres. Des algorithmes basés sur la courbure de l'interface permettent à chaque pas de temps de détruire les marqueurs en excès ou d'en créer de nouveaux. En deux dimensions, il est facile de réordonner les marqueurs après cette opération. Ce n'est pas le cas en 3 dimensions et on préfère alors redistribuer complètement sur l'interface un nombre fixe de marqueurs à chaque pas de temps.

Une onde de choc en incidence normale sur une surface libre perturbée donne naissance, après réflexion et transmission de l'onde de choc, à un champignon de liquide qui s'élève au dessus de la surface (instabilité de Richtmyer-Meshkov).

Contrairement aux prédictions antérieures – numériques ou théoriques – de la vitesse d'ascension du liquide, celle obtenue par une méthode de suivi d'interface [13] s'est avérée quantitativement en accord avec l'expérience.

3.2. Maillage adaptatif.

Pour gagner en précision, il est intéressant que le maillage lui-même suive la position de l'interface. Alors les conditions aux limites s'écriront facilement au niveau des nœuds placés sur l'interface, où la vitesse, pression, etc.. peuvent éventuellement être multivaluées. On choisira les conditions de continuité ou de saut en fonction du problème considéré. Par exemple, dans le cas d'un choc, ce sont les relations de saut de Rankine-Hugoniot qui seront utilisées. Du fait que chaque maille ne contient qu'une seule phase, les lois de conservation peuvent être réalisées avec une grande précision.

Pour cela, les nœuds du maillage qui se trouvent sur l'interface sont advectés avec le fluide. Cependant, l'application brutale de cette méthode conduit à une distorsion importante du maillage. Le rapport d'aspect des mailles peut devenir très différent de l'unité, et le calcul devient instable. Il est donc rapidement nécessaire de redéfinir quels sont les voisins de chacun des nœuds, voire de redistribuer les nœuds eux-mêmes sur l'interface.

J. Hyman [11] a suggéré, pour toujours garder des mailles de forme à peu près rectangulaire, de recourir à deux maillages duaux l'un de l'autre: chaque maille de l'un des maillages contient un et un seul nœud de l'autre maillage. Le premier maillage est fixe. Le second a certains de ses nœuds placés sur l'interface. Ceux-ci sont advectés par l'écoulement. Après déplacement du maillage partiellement mobile, on redéfinit les nœuds de ce dernier de façon à ce qu'il y ait toujours un seul nœud dans chaque maille du maillage fixe, et que ce nœud soit sur l'interface si celle-ci traverse la maille considérée. Il est ensuite très facile de relier les nouveaux nœuds entre eux pour obtenir le nouveau maillage complet. J. Glimm utilise une méthode similaire.

Des maillages adaptatifs ont en particulier été utilisés pour étudier la propagation des ondes de chocs [14, 15], ou la déformation de bulles à proximité d'une surface libre [16].

Du point de vue du temps de calcul, le fait de redéfinir le maillage à chaque pas de temps n'est pas très coûteux, si l'on compare au temps nécessaire par exemple pour calculer la courbure de l'interface [17].

3.3. Méthode SPH.

En poussant à l'extrême le désir de s'affranchir d'un maillage, on peut simplement le supprimer. La méthode SPH (Smooth Particle Hydrodynamics) suit le mouvement de particules lagrangiennes [18]. Les équations donnant le déplacement de chaque particule sont obtenues à partir des équations continues de la dynamique des fluides par interpolation entre des points éventuellement désordonnés. Cette méthode a été appliquée à la simulation d'écoulements à surface libre. Celle-ci est alors repérée par une autre espèce de particules, qui repoussent les particules fluides, ce qui permet de modéliser des forces de surface. Le code, explicite, nécessite l'emploi d'un faible pas d'espace.

4. Capture d'interfaces dans des modèles à deux fluides.

Les méthodes de suivi d'interface que nous venons de présenter suivent le mouvement de l'interface et en déduisent la répartition de chacune des phases dans l'espace. A l'opposé, les méthodes de capture d'interface –ou capture de front– repèrent la position des phases et en déduisent celle de l'interface. Un avantage important de cette dernière approche est que les reconnexions et ruptures d'interfaces s'effectuent spontanément, sans qu'un traitement spécial soit requis.

4.1. La méthode MAC (Marker And Cell).

La méthode MAC a été proposée en 1965 par F. Harlow et J. Welch pour simuler un fluide incompressible ayant une surface libre [19]. Comme pour le suivi d'interface, on place des marqueurs dans l'écoulement pour repérer le mouvement de chacune des phases. Mais ici, au lieu de disposer les marqueurs uniquement sur l'interface, on les répartit dans tout le volume de l'une des phases. Bien sûr, les marqueurs doivent être beaucoup plus nombreux que pour le suivi d'interface. On peut augmenter l'efficacité de la méthode en mettant au départ plus de marqueurs dans les régions voisines des interfaces.

Cette méthode est numériquement stable. Les interfaces sont malheureusement affectées par une diffusion numérique. La méthode a été étendue à trois dimensions. Cependant, le coût en mémoire et en calcul que requièrent les très nombreux marqueurs limite ses applications.

Il est a noter que lorsqu'on parle de méthode MAC, on ne fait souvent pas référence à l'existence de marqueurs, mais simplement à une façon de définir les variables : les vitesses sont définies au milieu des liens et les pressions sur les sites. Ainsi les gradients de pression exprimés au premier ordre par des différences finies sont centrés au milieu des liens comme les vitesses [20].

4.2. Lignes de niveau.

Les marqueurs introduits dans la méthode MAC servent essentiellement à donner la fraction de chacune des phases qui se trouve dans une cellule donnée. Cette donnée peut être remplacée par une fonction continue f indiquant en chaque point la fraction volumique. Celle-ci vaudra +1 dans l'une des phases et -1 dans l'autre. L'interface sera alors la ligne de niveau $f = 0$.

Le mouvement des lignes de niveau $f = f_0$ est donné par une équation d'advection [21, 22]

$$\partial_t f + \mathbf{v}.\nabla f = 0 \tag{10}$$

Une difficulté de cette méthode est que les schémas stables sont souvent diffusifs

(v. section 7.2.). Elle a été récemment étendue pour simuler des rapports de densité et de viscosité élevés aussi bien que des effets de tension de surface [23].

4.3. La méthode SLIC (Simple Line Interface Calculation).

Pour éviter la diffusion de l'interface, au lieu de considérer les variations continues de la fraction volumique, on peut considérer que l'interface est infiniment raide. La fraction volumique f continue est remplacée par une fonction F qui donne pour chaque cellule l'aire occupée par l'une des phases [24]. Ainsi, F vaudra 0 ou 1 si la cellule est occupée par une seule phase; sur l'interface, F prendra des valeurs intermédiaires entre 0 et 1. On peut étendre cette notion à plusieurs espèces en définissant dans chaque cellule la fraction volumique F_α de chacune des phases.

Ces données doivent être complétées par l'orientation de l'interface, de laquelle dépendra en particulier le calcul des flux de matière à travers les parois de la cellule. En 1976, W.F. Noh et P. Woodward ont proposé une nouvelle approche qui a inspiré nombre des méthodes de capture d'interface actuelles [25]. On considère une seule direction d'espace à la fois. Nous allons décrire la méthode en choisissant la direction horizontale.

Dans chaque cellule, on caractérise chaque phase par la donnée non seulement de F_α mais aussi par deux variables binaires (IL_α, IR_α) indiquant si on trouve du fluide α respectivement à gauche et à droite de la cellule. Le couple (IL_α, IR_α) ne peut prendre que 4 valeurs différentes (0,0), (0,1), (1,0) et (1,1). Les diverses phases vont être réparties dans la cellule en les délimitant uniquement par des lignes horizontales et verticales. Cela est illustré par la Figure 1 dans le cas où un seul fluide est présent dans la cellule, pour les quatre valeurs possibles du couple (IL_α, IR_α) et pour une même fraction volumique. S'il y a plusieurs fluides dans la cellule, ceux ayant le même couple (IL_α, IR_α) seront séparées par des lignes horizontales, ce qui permet de les traiter tous de façon équivalente lors de l'étape d'advection (voir Figure 2). Les fluides ayant des couples différents seront généralement séparés par des lignes verticales. Cela permet lors de la phase d'advection de déplacer les différentes phases les unes après les autres et de remédier

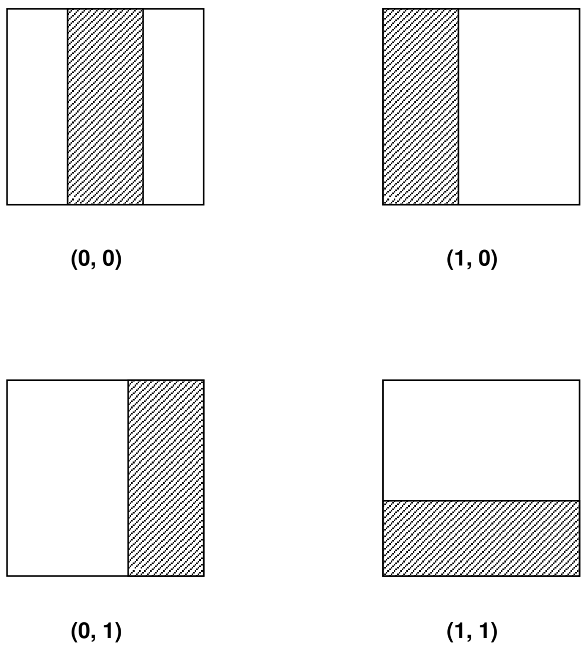

Figure 1: *Répartition du fluide dans la cellule en fonction de la valeur du couple* (IL_α, IR_α) *indiquant la présence ou l'absence de fluide à droite et à gauche de la cellule. La fraction volumique est la même dans les quatre cellules représentées.*

ainsi au moins partiellement à la diffusion non-physique des interfaces qui affectait les méthodes de capture d'interface antérieures.

Puisqu'on explore les directions d'espace les unes après les autres, cette méthode s'étend très facilement à n'importe quelle dimension d'espace. De plus, le nombre de phases présentes dans une cellule donnée n'est pas fixé. Des reconnexions ou ruptures d'interfaces peuvent se produire sans que les règles d'évolution doivent en être modifiées pour autant.

4.4. La méthode VOF (Volume Of Fluid).

4.4.1. Présentation de la méthode.

C.W. Hirt et B.D. Nichols ont proposé une variante du modèle SLIC, qui permet d'améliorer le comportement des interfaces, notamment en réduisant encore la diffusion de celles-ci et le nombre de débris laissés en chemin. Ils restreignent leur

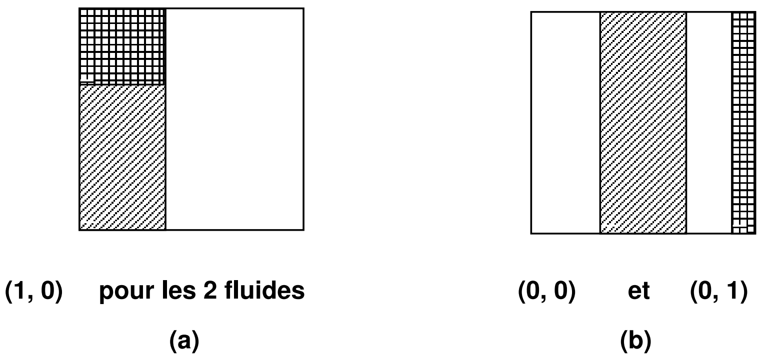

Figure 2: *Cas où plusieurs fluides sont présents dans la cellule. (a) Les deux fluides ont le même couple. Ils sont séparés par une ligne horizontale et traverseront en même temps la paroi latérale lors de l'advection. (b) Les deux fluides ont des couples différents. Ils sont séparés par une ligne verticale et traverseront l'un après l'autre la paroi latérale.*

champ d'application au cas d'un seul fluide ayant une surface libre [24].

Avant de présenter les spécificités de ce modèle, rappelons comment est structuré l'algorithme de simulation dans la plupart des codes de capture de front:

(i) au début d'un nouveau pas de temps, une première estimation des nouvelles vitesses est obtenue à partir d'une discrétisation explicite de la seconde équation de Navier-Stokes (4), en gardant pour la pression et les termes advectifs et visqueux les valeurs du pas de temps précédent.

(ii) Un processus itératif ajuste les pressions et vitesses jusqu'à ce que l'équation de continuité (3) soit vérifiée. Celle-ci s'écrit pour un fluide incompressible

$$\nabla.\mathbf{v} = 0 \tag{11}$$

et pour un fluide faiblement compressible (c grand)

$$\frac{1}{c^2\rho}\partial_t p + \nabla.\mathbf{v} = 0. \tag{12}$$

(iii) Finalement, on doit faire évoluer la fraction volumique F occupée par le fluide dans chaque cellule.

La variation de F est liée aux flux rentrant et sortant de la cellule par

$$F_{ij}^{t+1} = F_{ij}^{t} + \delta t \left[\Phi^{y}_{i,j-1/2} - \Phi^{y}_{i,j+1/2} + \Phi^{x}_{i-1/2,j} - \Phi^{x}_{i+1/2,j}\right]. \tag{13}$$

La décomposition de l'opérateur de flux Φ en deux opérateurs Φ^x et Φ^y respectivement selon x et y est exacte dans le cas de pas d'espace infinitésimaux. Ici où le pas d'espace est fini, il s'agit d'une approximation. Le point crucial de la méthode est de définir les flux Φ^x et Φ^y à travers les parois des cellules de telle manière que les interfaces restent bien définies.

Hirt et Nichols ont introduit la notion de cellules donneuses et accepteuses. Si on considère deux cellules adjacentes, la cellule accepteuse est celle vers laquelle pointe la composante de vitesse u normale à la face qui sépare les deux cellules. L'autre cellule sera dite donneuse. Ainsi, le transfert de matière (ou de vide) aura toujours lieu de la cellule donneuse vers la cellule accepteuse. On distingue ensuite deux définitions des flux de matières, parmi toutes celles qui sont possibles. Dans la figure 3-a, la section e à travers laquelle le fluide est échangé est déterminée à partir de la quantité de fluide F_D contenue dans la cellule donneuse. Le flux d'une cellule à l'autre vaut alors $F_D u \delta t$. Le schéma est dit *amont*.

Dans le cas (b), c'est la fraction de fluide F_A contenu dans la cellule accepteuse qui sert de référence. Il s'agit d'un schéma *aval*.

Bien sûr, une cellule ne peut pas donner à sa voisine plus de fluide qu'elle ne contient, ni en accepter au-delà de la place vide dont elle dispose. Les expressions complètes des flux sont en fait plus compliquées que celle donnée en exemple pour le cas (a) et font intervenir des fonctions MIN et MAX pour assurer que F reste toujours entre 0 et 1. La figure 3-c illustre comment ces limitations peuvent être mises en jeu.

Le schéma aval tend à raidir les interfaces (diffusion négative) tandis que le schéma amont les étale par diffusion. Puisqu'on veut garder des interfaces bien définies, le schéma aval semble plus indiqué. Cependant, si l'interface est déformée par une ondulation sinusoidale, le schéma aval va renforcer la fluctuation jusqu'à obtention de dents de scie. L'idée finale –toujours dûe à Hirt et Nichols– est donc d'employer le schéma aval lorsque la propagation est normale à l'interface et le schéma amont si elle lui est parallèle. L'orientation de l'interface est évaluée en examinant les fractions d'occupation dans les cellules voisines.

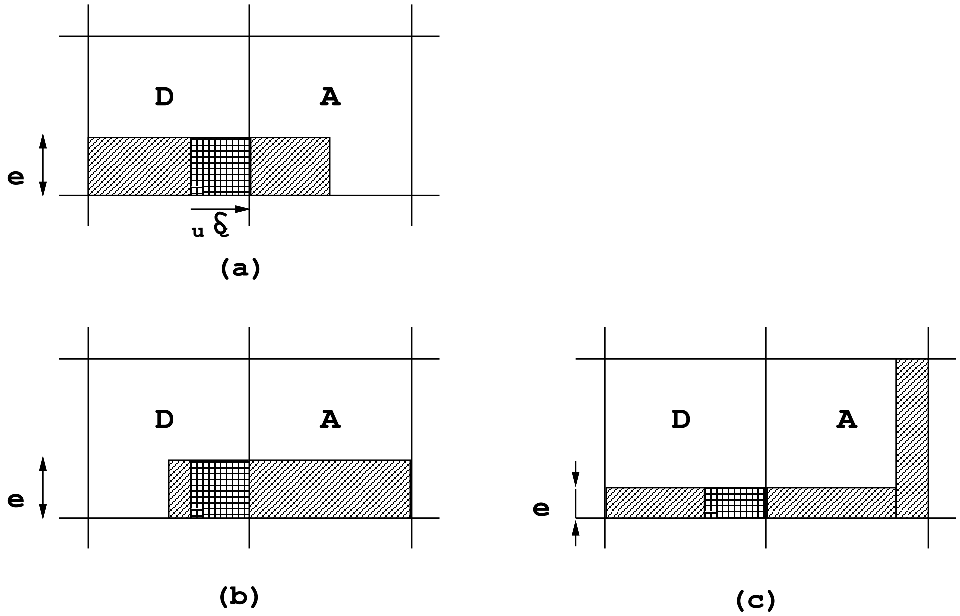

Figure 3: *Définitions amont (cas a) et aval (cas b et c) des flux entre une cellule donneuse D et une cellule accepteuse A. Le fluide est représenté par une surface hachurée en biais. La quantité de fluide transmise de la cellule D vers la cellule A correspond à la partie quadrillée. On a supposé ici que la composante de vitesse du fluide normale à la face qui sépare les deux cellules va de la gauche vers la droite.*

Si on utilise la méthode telle que nous l'avons décrite jusqu'ici, les interfaces laissent tout de même quelques débris derrière elles. Pour limiter cela, toutes les cellules de fraction volumique F proche de 0 ou 1 à ϵ près (par exemple 10^{-6}) sont ramenées exactement à zéro ou à 1.

Il peut également se produire que les flux sur plusieurs faces d'une même cellule conjuguent leur action de telle sorte que la fraction volumique dans la cellule soit finalement supérieure à 1 ou inférieure à 0. Cela ne peut se produire que si la condition d'incompressibilité n'est pas exactement vérifiée, soit parce qu'on a choisi délibérément de résoudre l'équation (12) faiblement compressible, soit parce que des erreurs sont introduites dans la résolution de l'équation (11) d'incompressibilité au niveau de l'interface. En effet puisque l'on considère une interface libre, l'interface est le lieu d'un saut de densité très brutal. Il faudrait connaître avec précision sa position. A défaut, VOF utilise des interpolations linéaires pour évaluer pressions et vitesses sur la surface libre. Les erreurs ainsi introduites peuvent provoquer l'apparition de fractions volumiques négatives ou supérieures à 1. Dans ce cas, on ramène simplement la valeur de F respectivement à 1 et à 0.

Précisons que pour écrire les conditions aux limites sur la surface libre, l'interface dans chaque cellule est assimilée à un segment de droite perpendiculaire à la normale évaluée d'après l'occupation des cellules voisines. L'interface résultante est donc discontinue. Des effets de tension de surface peuvent être incorporés en évaluant sur le voisinage la courbure moyenne de l'interface.

L'équation (13) garantissait (pour des fluides incompressibles) la conservation du volume total de chaque phase. Malheureusement, les réajustements de F que l'on effectue ensuite détruisent cette propriété. Ce défaut, auquel s'ajoute la dégradation des interfaces, pénalise assez fortement la méthode. Nous allons voir dans la suite comment on a pu y remédier. L'apport de la méthode VOF à ce stade réside surtout dans la façon de choisir le schéma en fonction de l'orientation de l'interface.

4.4.2. Le code SURFER.

En partant de la méthode VOF, S. Zaleski a proposé en 1992 une version qui conserve exactement la masse et traite de façon symétrique les deux phases.

Tout d'abord, la masse est de nouveau exactement conservée en proposant une autre solution au problème d'altération des interfaces. Par exemple, dans le cas d'une cellule à fraction volumique non entière mais proche de 0 ou 1 à ϵ près, et isolée au milieu d'une région monophasique, VOF supprime purement et simplement la phase isolée. L'alternative proposée dans SURFER est de repérer ces cellules isolées grâce à un indicateur $I(\mathbf{x})$ qui vaut 0 si la masse des 4 voisins immédiats est supérieure à $4-\epsilon'$ ou inférieure à ϵ', et 1 sinon. A chaque fois que I vaut 0, c'est le schéma amont qui est employé. La diffusion ainsi introduite dissout les débris dans la phase majoritaire.

De plus, on a vu que la fraction volumique pouvait devenir négative ou supérieure à 1 lorsque la condition d'incompressibilité n'était pas exactement vérifiée. Le nouveau code, appelé SURFER, ne considère plus un seul fluide avec une surface libre, mais deux fluides, ce qui diminue le saut de densité sur l'interface. On impose de plus que la condition d'incompressibilité (11) soit vérifiée avec une grande précision. Alors le schéma est beaucoup plus stable et on n'a plus besoin de ramener brutalement F à une valeur entre 0 et 1.

Le code SURFER permet de simuler deux fluides non-miscibles. Des indications sont données sur la façon de généraliser le modèle à plus de deux phases. Le modèle peut facilement être étendu à 3 dimensions et programmé sur des machines massivement parallèles.

Mentionnons qu'au lieu d'introduire la tension de surface au niveau des conditions aux limites sur la surface libre sous forme de loi de Laplace, le code SURFER la fait apparaître dans les équations de conservation de la quantité de mouvement comme un tenseur de pression isotrope dans chacune des phases mais anisotrope sur l'interface. Cette démarche est couramment employée dans les approches de gaz sur réseau qui seront décrites dans la suite. On évite ainsi la difficile et imprécise évaluation de la courbure de l'interface [26, 27]. La manière d'introduire de la tension de surface est indépendante du choix de la méthode pour faire évoluer l'interface. Ainsi, l'alternative à la loi de Laplace mentionnée ci-dessus peut tout aussi bien être utilisée avec des méthodes de suivi d'interface. Néanmoins dans le cas des méthodes de suivi d'interface le maillage suit exactement l'interface et donc le saut de pression qui découle de la loi de Laplace peut être plus facilement imposé sur celle-ci.

4.5. Approximation de l'interface par pans coupés. Application aux écoulements compressibles.

La méthode VOF s'est avérée efficace pour les écoulements incompressibles. Dans le cas compressible, elle est parasitée par l'imprécision sur la conservation de la masse et la dégradation des interfaces. Selon une idée de Ashgriz et Poo [28], S. Zaleski et J. Li utilisent l'approximation de l'interface par pans coupés pour étendre le code SURFER au cas compressible. Cette approche est très puissante et ne ralentit ni ne complique beaucoup les calculs. Elle permet de décrire le déplacement de l'interface avec une précision du second ordre [29] alors que VOF et SURFER ne sont précis qu'au premier ordre. L'idée est de définir l'interface comme un segment de droite orienté perpendiculairement à la normale à l'interface. Cette représentation était déjà utilisée dans VOF, mais utilisée uniquement pour écrire les conditions aux limites sur l'interface. Pour la propagation on se ramenait à des segments orthogonaux ou parallèles au maillage. Ici, le fluide est advecté dans la direction de la vitesse en conservant la définition par pans coupés de l'interface (v. figure 4).

L'étude de l'instabilité d'une interface liquide-gaz cisaillée tangentiellement (instabilité de Kelvin-Helmholtz) a été réalisée en 2D à l'aide de ce modèle [30]. Il s'avère que les éjections de gouttes ont lieu pour des nombres de Weber et de Reynolds beaucoup plus élevés que ce que prédit la théorie linéaire. On doit cependant noter que, comme le terme de tension de surface du schéma converge assez lentement lorsqu'on réduit le pas d'espace, l'estimation du nombre de Weber dans les simulations requiert certaines précautions.

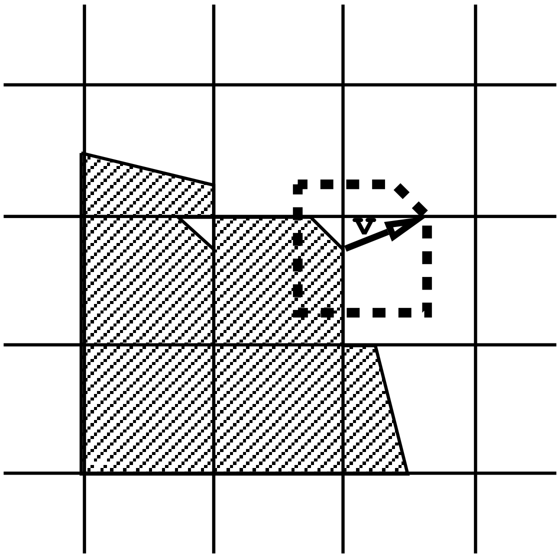

Figure 4: *Approximation de l'interface par pans coupés. La partie occupée par le fluide est hachurée. La ligne en pointillés indique la position du contenu de l'une des cellules après advection dans la direction de la vitesse locale représentée par une flèche. Le fluide est ensuite distribué entre les diverses cellules qu'il recouvre partiellement.*

4.6. Détermination de la normale à l'interface.

Un consensus semble admettre que le seul moyen de déterminer avec une précision suffisante la normale à l'interface en un site donne est la suivante. On regarde lesquelles des fractions volumiques de ce site et de ses 8 voisins sont différentes de 0 ou de 1. Toutes les configurations possibles doivent être envisagées individuellement. Selon les cas, la formule donnant l'orientation de l'interface en fonction des 9 fractions volumiques varie [31]. Cela permet d'obtenir des schémas du second ordre sur l'interface.

4.7. Les méthodes multigrilles

Même si cela n'est pas directement lié au caractère diphasique des écoulements, il est bon de mentionner que les méthodes de capture de front peuvent bénéficier, contrairement aux méthodes qui seront décrites dans la section suivante, d'une résolution des équations de type multigrille [32, 33]. Cela permet d'augmenter très sensiblement les vitesses de calcul. En particulier, le code SURFER utilise l'approche multigrille pour résoudre la condition d'incompressibilité (11) qui est comme on l'a vu déterminante pour la qualité des résultats. Cela permet de gagner un facteur 100 sur la vitesse du code.

Le principe consiste à faire évoluer rapidement les plus grandes longueurs d'onde en résolvant les équations sur un maillage à grandes mailles. On fait ensuite le va-et-vient entre ce maillage grossier et des maillages de plus en plus fins pour résoudre à des échelles de plus en plus petites. Malgré le coût du passage d'une grille à une autre, le gain de temps global est significatif. Si la taille du système est N (nombre de mailles sur la plus petite grille), une méthode de relaxation classique requiert un temps proportionnel à N^4. Ce facteur est ramené à N^2 pour un schéma multigrille.

5. Modèles à création spontanée d'interfaces.

5.1. La méthode de gaz sur réseau.

Nous allons maintenant nous placer d'un point de vue complètement différent des précédents. Au lieu de résoudre les équations de Navier-Stokes, nous construisons un modèle microscopique dont l'évolution à grande échelle est hydrodynamique. Seules les règles d'évolution microscopiques sont définies. Le comportement macroscopique qui en résulte n'est pas explicitement imposé au départ.

Le premier gaz sur réseau de ce type, tel qu'il a été proposé en 1986 par Frisch, Hasslacher et Pomeau (modèle FHP), est un gaz fictif constitué de particules ponctuelles qui se déplacent sur un réseau triangulaire bidimensionnel [34]. Les vitesses sont discrétisées et ne peuvent prendre que 7 valeurs différentes dont l'une est nulle et dont les 6 autres correspondent aux 6 directions du réseau et ont toutes le même module.

Le système évolue par alternance d'étapes de propagation où chaque particule saute au site voisin dans la direction où pointe sa vitesse, et d'étapes de collision où les particules qui se rencontrent en un même site rentrent en collision selon des règles préétablies qui conservent la masse et la quantité de mouvement.

Un principe d'exclusion impose qu'en un site donné, une seule particule à la fois puisse prendre une vitesse donnée. Cela permet de représenter l'état d'un site sous forme d'un vecteur booléen.

La forme des équations macroscopiques qui régissent le mouvement d'un fluide ne dépend que des lois de conservation et des symétries du système. Le détail des règles d'évolution n'influe que sur la valeur des coefficients de transport tels que la viscosité, le coefficient de diffusion, etc. Il a été montré que le modèle FHP obéit dans la limite incompressible aux équations de Navier-Stokes. Il permet donc de faire des simulations hydrodynamiques [35].

Une extension à trois dimensions, appelée modèle FCHC, a été proposée en 1986 par d'Humières, Lallemand et Frisch [36]. L'un des problèmes qui se pose alors est la grande taille des tables de collision et leur optimisation en vue d'une réduction de la viscosité. Rem et Somers ont proposé un algorithme qui permet d'y remédier [37].

Ces modèles sont séduisants par la simplicité des règles qui régissent leur évolution, et par leur aptitude intrinsèque à être programmés sur des machines parallèles ou spécialisées [38, 39].

Puisque l'on travaille sur des variables booléennes, les vitesses de calculs pour une seule simulation d'un problème donné sont accrues d'un facteur d'ordre 100 (et davantage sur les machines spécialisées) par rapport aux méthodes classiques. La contrepartie en est que les résultats sont plus bruités. Une vitesse locale par exemple sera obtenue en faisant une moyenne sur une trentaine de sites situés dans la même région, ou sur plusieurs pas de temps lorsque le problème étudié est stationnaire. On peut aussi avoir recours à des moyennes d'ensemble sur plusieurs simulations du même phénomène macroscopique mais qui diffèrent à l'échelle microscopique. Ainsi, pour obtenir des résultats à un degré de précision donné, les gaz sur réseau sont plutôt moins performants que les méthodes classiques. La méthode sera intéressante lorsque l'on s'intéresse à des grandeurs auto-moyennantes telles qu'une perméabilité pour un écoulement en milieu poreux, un débit, etc...

Une autre limitation de la méthode est l'impossibilité de réduire arbitrairement la valeur de la viscosité. Ainsi on ne sait pas simuler des écoulements pour des nombres de Reynolds supérieurs à quelques centaines. D'autre part, lorsque la vitesse de l'écoulement devient une fraction importante de la vitesse du son, des phénomènes pathologiques apparaissent, tels que la dépendance de la pression et de la viscosité avec la vitesse.

L'un des points forts de la méthode est la facilité avec laquelle les conditions aux limites solides peuvent être réalisées. Pour une condition de non-glissement par exemple, il suffit de modifier les règles de collision au niveau des sites solides: chaque particule est renvoyée dans sa direction incidente, par renversement de sa vitesse. L'emploi de ce type de condition aux limites a été justifié par des études théoriques précises [40, 41].

La méthode sera donc réservée à des écoulements à faibles vitesses, mais complexes (multiphasiques, réactifs...) dans des géométries compliquées (milieux poreux). Elle permet de faire le lien entre la physique microscopique introduite par le biais des règles d'évolution, et la physique macroscopique.

5.2. Les écoulements multiphasiques par la méthode de gaz sur réseau.

La méthode de gaz sur réseau offre plusieurs avantages pour simuler des écoulements multiphasiques [42]. Tout d'abord, par construction, la masse et la quantité de mouvement sont automatiquement conservées. D'autre part, l'interface se forme spontanément; il n'est pas nécessaire de savoir où se trouve l'interface pour faire évoluer le système et les règles d'évolution sont les mêmes en tous les sites. Enfin, les changements de topologie des interfaces (rupture, coalescence) s'effectuent spontanément et aucun traitement spécial n'est requis.

Nous allons maintenant décrire deux modèles. Le premier modélise deux fluides non-miscibles [43]. Il a été proposé en 1988 par Rothman et Keller. Récemment ces deux modèles ont été étendus à trois dimensions [44, 45].

Le second, développé depuis 1989 à l'Ecole Normale Supérieure, comporte une seule espèce de particules. L'existence d'une force attractive entre les particules provoque une transition de phase de type liquide–gaz [46].

La méthode de gaz sur réseau monophasique a fait l'objet de validations assez poussées [47, 41, 48]. Par contre en multiphasique, les validations quantitatives sont plus limitées, pour deux raisons. D'une part les résultats expérimentaux sont moins nombreux. D'autre part, la difficulté à faire varier de façon importante les paramètres de la simulation (et donc les nombres sans dimension associés) est un handicap certain pour confronter directement les résultats à des expériences. Des comparaisons quantitatives de perméabilité ont pu tout de même être faites [49]. Des résultats théoriques tels que la divergence des coefficients de transport en deux dimensions ont pu être vérifiés pour la première fois par cette méthode.

5.2.1. Le modèle à deux fluides non-miscibles.

On introduit deux espèces de particules, rouges et bleues. Les particules de même couleur s'attirent tandis que celles de couleur différente se repoussent. En pratique, les interactions sont réalisées de la façon suivante.

Dans un premier temps, les collisions sont effectuées sans tenir compte de la couleur des particules. La seconde étape vise a créer de la tension de surface. La position de l'interface est évaluée en calculant le gradient de couleur

$$\mathbf{f} = \sum_{\mathbf{i}} \mathbf{c_i} \left[\rho_{\mathbf{R}}(\mathbf{x} + \mathbf{c_i}) - \rho_{\mathbf{B}}(\mathbf{x} + \mathbf{c_i})\right] \tag{14}$$

Puis on choisit des paires de particules de vitesses opposées et on cherche à les aligner le plus possible avec le gradient de couleur. Cela augmentera la pression normale par rapport à la pression tangentielle lors de la prochaine étape de propagation. Cette opération n'a lieu que si le module de $\mathbf{f}$ est supérieur à un certain seuil, c'est–à–dire si l'on est effectivement sur l'interface.

Les couleurs doivent ensuite être redistribuées entre les états de vitesse. Parmi tous les choix possibles, on sélectionne celui qui maximise $\mathbf{q}.\mathbf{f}$, où $\mathbf{q}$ est le flux de couleur après collision

$$\mathbf{q} = \sum_{\mathbf{i}} \left[\mathbf{R}'_{\mathbf{i}}(\mathbf{x}) - \mathbf{B}'_{\mathbf{i}}(\mathbf{x})\right] \mathbf{c_i} \tag{15}$$

Cette dernière opération introduit une antidiffusion qui conduit dans une certaine gamme des paramètres à une séparation de phase spontanée (Figure 5).

Le coefficient de diffusion a été calculé théoriquement, donnant accès au diagramme de phase dans l'espace des paramètres [50]. La tension de surface a été prédite [51].

Le modèle a été appliqué à l'étude des écoulements en milieux poreux. Dans le cas d'un écoulement multiphasique, l'approche habituelle consiste à définir une perméabilité relative indépendamment pour chacun des fluides. Les simulations par gaz sur réseau ont permis de mettre en évidence un couplage non linéaire entre les deux fluides, suivant des relations de type Onsager [49].

Une extension du modèle à N fluides où N est arbitraire permet de simuler des suspensions de particules fluides [52]. Des effets de ségrégation observés expérimentalement ont pu être reproduits [53].

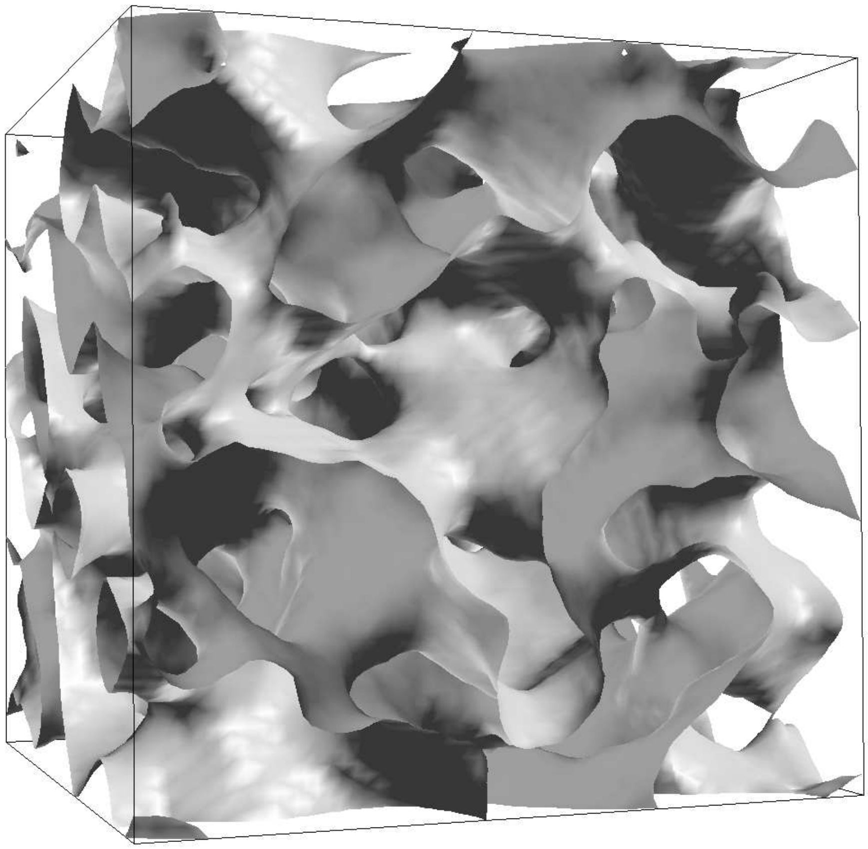

Figure 5: *décomposition spinodale après 3032 pas de temps, pour une fraction volumique de particules rouges égale à 50%. On ne visualise que les interfaces. Les deux phases sont continuement interconnectées. Les conditions aux limites sont périodiques. La taille du maillage est* 128^3.

5.2.2. Le modèle liquide–gaz.

Une interaction attractive entre les particules est ajoutée de la façon suivante. Une distance d'interaction r est choisie au début de la simulation. On explore toutes les paires de sites situés exactement à une distance r l'un de l'autre. Si deux particules appartenant à chacun des sites sont en train de s'éloigner l'une de l'autre, leur vitesse est renversée de façon à ce qu'elles se dirigent l'une vers l'autre. Cette définition purement dynamique de l'interaction correspond à un transfert négatif de quantité de mouvement d'un site de la paire vers l'autre.

La force attractive ainsi introduite joue le rôle des forces de cohésion d'un liquide. Alors en partant d'une densité uniforme, pour une certaine gamme de paramètres, le fluide se sépare spontanément en deux phases [46]. L'une, dense sera appelée liquide, tandis que la phase diluée a les caractéristiques d'un gaz. Au cours du temps, les domaines croissent selon des mécanismes également observés dans les expériences (coalescence, redissolution des plus petits domaines sous l'effet de la tension de surface, rupture de films liquides).

On peut prédire et mesurer la pression pour diverses valeurs de la densité. L'équation d'état est de type Van der Waals [54]. La loi de Laplace, qui relie la différence des pressions de part et d'autre d'une interface courbe à la courbure de celle-ci et à la tension de surface, découle directement de la conservation de la quantité de mouvement et est bien vérifiée par le modèle, comme on pouvait s'y attendre.

Bien que les résultats habituels de la thermodynamique ne s'appliquent pas directement à ce type de modèles, faute d'avoir une équation de conservation de l'énergie en plus des conservations de la masse et de l'impulsion, on a pu prédire la pression et les densités d'équilibre ainsi que la tension de surface [55]. Les relations de Gibbs-Thomson, qui donnent les pressions d'équilibre en fonction de la courbure de l'interface sont bien vérifiées, à un coefficient multiplicatif près [54].

Des simulations d'évaporation en milieu poreux ont permis de mettre en évidence la possibilité qu'une part non négligeable du transfert de matière s'effectue par les films de mouillage [56].

5.3. La méthode de Boltzmann.

Nous allons maintenant décrire la méthode dite de Boltzmann, qui est au départ dérivée des gaz sur réseau. Les variables booléennes indiquant l'occupation d'un site sont remplacées par des variables réelles, qui sont les probabilités d'occupation de ce même site. Le bruit microscopique intrinsèque aux simulations par gaz sur réseau est alors supprimé. Par contre, les temps de calcul redeviennent comparables aux méthodes classiques. Pour des modèles complexes, la version Boltzmann du code est généralement plus facile à étendre à trois dimensions.

Une étape importante dans l'histoire de ces méthodes a consisté à s'affranchir de la relation directe qui existait au départ avec les modèles booléens de gaz sur réseau. On peut alors définir à peu près arbitrairement la distribution d'équilibre vers laquelle on veut tendre. Cela a permis entre autres d'augmenter le nombre de Reynolds sans que les pathologies signalées pour le modèle booléen apparaissent. Des simulations en régime turbulent, comparées avec des résultats de méthodes spectrales, ont donné de très bons résultats [57].

Une version de type méthode de Boltzmann du modèle à fluides non-miscibles décrit ci-dessus a été développée en 1991 par A. Gunstensen et D. Rothman [58]. Le modèle a été repris par R. Rybka et al. [59] pour étudier la dynamique de la séparation de phase en 2 dimensions, éventuellement au sein d'un milieu poreux. A Los Alamos, X. Shan et H. Chen ont écrit un code de Boltzmann permettant de simuler des transitions liquide-gaz, ou des mélanges de fluides non-miscibles [60].

I. Ginzbourg a déterminé théoriquement les conditions aux limites sur l'interface qui découlent des règles d'évolution choisies pour le modèle de Rothman et Gunstensen [61]. Elle trouve que ce n'est pas la continuité de la vitesse tangentielle qui est assurée, mais celle de la quantité de mouvement. Ainsi, lorsque les deux fluides ont des densités différentes, la vitesse tangentielle subit une discontinuité sur l'interface. Ce résultat n'est pas surprenant dans la mesure où la dynamique conserve localement la quantité de mouvement. Il serait intéressant de refaire une étude semblable pour le modèle liquide-gaz.

6. Résolution d'autres équations que Navier--Stokes.

Jusqu'ici nous avons considéré des méthodes basées sur les équations de Navier-Stokes de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Il peut être préférable de partir d'autres équations, soit plus simples parce que le problème considéré permet de faire des approximations (sections 6.1., 6.2. et 6.3.), soit plus compliquées pour prendre en compte des effets complémentaires (sections 6.4. et 6.5.).

6.1. Equations d'Euler. Méthode de couche de vorticité.

Un effet important de la viscosité dans les équations de Navier-Stokes est de créer de la vorticité sur les interfaces. Par contre en dehors de l'interface les forces visqueuses peuvent être négligeables devant les forces inertielles. C'est le cas en particulier pour l'étude de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz entre deux fluides non visqueux en 2 dimensions. Il est intéressant de négliger la viscosité partout sauf sur l'interface. Les équations de Navier-Stokes se réduisent aux équations d'Euler (nombre de Reynolds grand devant 1). Selon une idée de Birkhoff et Rott (1959), l'interface est traitée comme une couche de vorticité très fine. Son évolution est donnée par l'équation de Birkhoff et Rott [62], qui fait en particulier intervenir la circulation en tout point de l'interface.

Numériquement, on discrétise cette couche de vorticité. L'évolution de la position de l'interface est donnée par le mouvement de chaque vortex sous l'action conjuguée de tous les autres. La différence de densité entre les deux phases et les effets de tension de surface peuvent être pris en compte dans les équations gouvernant l'évolution de la circulation pour chaque vortex [63, 64]. Comme pour des marqueurs passifs, on compense l'accumulation ou la raréfaction des vortex sur certaines portions de l'interface en rediscrétisant celle-ci à chaque pas de temps. Des parois solides peuvent être ajoutées en injectant de la vorticité à leur emplacement. La méthode de couche de vorticité ne peut guère être étendue au-delà de deux dimensions.

6.2. Equations de Stokes. Méthode à intégrale frontière.

Pour les fluides très visqueux (petit nombre de Reynolds), les équations de Navier-Stokes se réduisent aux équations de Stokes. Si on étudie par exemple une goutte, le champ de vitesse en tout point du fluide peut être exprimé comme une intégrale ne faisant intervenir que les points de l'interface [65]. La résolution de cette intégrale, associée à un maillage déformable, a permis entre autres à W. Uijttewaal et al. d'étudier l'influence d'une paroi solide sur une goutte déformée par un écoulement cisaillé [66].

6.3. Théorie de la lubrification.

Lorsqu'on étudie l'interaction d'une goutte avec une surface libre ou la coalescence de deux gouttes, le film liquide séparant les deux objets peut devenir mince. On aura avantage dans cette région à utiliser les résultats de la théorie de la lubrification (v. figure 6) [67, 68]. Ainsi, les équations de Navier-Stokes seront employées pour déterminer l'écoulement partout sauf dans le film liquide où elles seront remplacées par les équations de la lubrification [16]. Ceci nécessite des raccordements entre blocs qui ne sont pas sans poser problèmes. La meilleure solution semble être de considérer des blocs qui se recouvrent au niveau des frontières, au lieu de blocs simplement jointifs. La solution au bord de chaque domaine sert ainsi de conditions au limites pour l'autre domaine. Dans tous les cas, les raccordements de domaines font naître une viscosité parasite que l'on ne sait pas éviter. Il est difficile d'éviter que le raccordement ne diminue l'ordre de la solution. Néanmoins ce type de simulation est à même d'apporter des informations précieuses sur les déformations et mécanismes physiques mis en jeu à l'échelle d'une goutte ou bulle lors d'une interaction avec un autre élément.

6.4. L'équation de Ginzburg-Landau.

Parmi les méthodes décrites dans ce rapport, seules les méthodes de gaz sur réseau ou de Boltzmann simulent la séparation de phase elle-même. Dans les autres cas, on suppose que les deux phases sont bien séparées dès le départ. Il existe une autre possibilité pour rendre compte de la séparation de phase qui consiste à définir une énergie libre de type Ginzburg-Landau:

$$F = \int \left(\tau\psi^4 - g\psi^2 + \frac{D}{2}(\nabla\psi)^2 \right) d\psi. \tag{16}$$

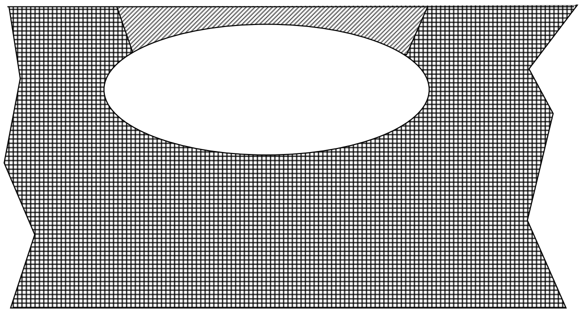

Figure 6: *Résolution par blocs. On étudie l'interaction d'une goutte avec une surface libre. Les zones blanches sont gazeuses et le reste est rempli de liquide. Dans les régions hachurées et quadrillées, on résoud respectivement les équations de la théorie de la lubrification, et les équations complètes de Navier-Stokes.*

Le paramètre d'ordre ψ sera par exemple la fraction volumique moyenne de l'une des phases. L'équation d'évolution de ψ est déterminée par le choix de cette énergie libre. Sous sa forme la plus simple, l'équation dite de Cahn-Hilliard s'écrit

$$\partial_t \psi = -M\Delta \left(D\Delta\psi - 4\tau\psi^3 + 2g\psi \right) \tag{17}$$

où M, D, τ et g sont des constantes phénoménologiques positives [69]. On peut ajouter éventuellement des effets hydrodynamiques [70], ou un bruit aléatoire [71]. L'équation sera généralement résolue numériquement par découpage de l'espace en cellules (CDS – Cell Dynamical System). Une méthode CDS efficace a permis à Puri et Dünweg [70] de mesurer le mode de croissance linéaire prédit par Siggia [72] pour la démixion d'un équimélange.

6.5. Thermique et combustion.

Nous nous sommes limités dans ce rapport à la résolution des deux premières équations de Navier-Stokes, liées à la conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Bien sûr des effets thermiques peuvent être pris en compte en rajoutant une troisième équation de conservation de l'énergie. Ce sera le cas pour traiter des problèmes par exemple de solidification [26] ou de combustion [73]. Des méthodes de type capture de front ont en particulier été proposées par Chorin [73, 26]. Signalons que la méthode de gaz sur réseau n'est pas adéquate pour prendre en compte les effets thermodynamiques. Par exemple, du fait de la discrétisation des niveaux d'énergie, pressions cinétique et thermodynamique ne coïncident plus

[74]. Cependant nous ne présenterons pas ici les méthodes adaptées à la thermique, qui nécessiteraient à elles seules un autre rapport.

7. Applications technologiques des méthodes.

Nous allons dans cette section donner des exemples d'applications semi-industrielles des modèles multiphasiques.

7.1. Modèles diphasiques sans simulation explicite de l'interface.

EDF a développé deux codes de résolution des équations de Navier-Stokes, offrant la possibilité de simuler des écoulements qui charrient des inclusions solides ou liquides [75, 76]. Les interfaces ne sont pas suivies explicitement. On a recours à des méthodes type modèles de mélange tels qu'ils ont été décrits dans la section 2.2.. Les méthodes de simulation des écoulements à inclusions liquides ou solides ne sont pas fondamentalement très différentes. Dans le cas liquide, les expressions des termes de couplage seront plus complexes.

MELODIF est un code bidimensionnel de recherche servant par exemple à préciser quelles relations de fermetures doivent être employées pour modéliser le couplage entre l'écoulement principal et les inclusions, en particulier dans le cas d'un écoulement turbulent fortement chargé en particules. Les relations de fermeture de type k-ϵ sont modifiées à cause de la force de traînée des particules. Une part de la recherche actuelle consiste donc à améliorer la modélisation diphasique de la turbulence. Ce travail est mené en collaboration avec l'IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse) [77]. Le couplage entre thermohydraulique et électromagnétisme peut également être pris en compte. Pour nombres de problèmes, le caractère tridimensionnel de l'écoulement ne peut être ignoré. C'est dans cette optique qu'a été développé le code tridimensionnel ASTRID. Il est utilisé pour simuler le circuit primaire et le cœur de chaudières nucléaires. Un autre domaine d'application en forte expansion concerne les lits fluidisés de particules solides. Cette technologie est utilisée pour le séchage (betterave), le chauffage électrique de produits pulvérulents, ou la combustion en lit fluidisé dans les chaudières à combustible fossile. Dans ce dernier cas, les simulations numériques pourront être utilisées pour évaluer les diverses solutions proposées par les constructeurs en vue d'une extrapolation en puissance des chaudières actuelles. La combustion en lit fluidisé du charbon, caractérisée par des teneurs en NO_x et SO_2 dans les fumées moins grandes que par d'autres procédés, devrait connaître une extension dans les vingt années à venir en raison en particulier des nouvelles réglementations sévères concernant les rejets.

La Société Nationale des Poudres et Explosifs (SNPE) s'est quant à elle intéressée à au problème du dépôt des particules d'alumine sur le fond des chambres de combustion. Il suffira de mentionner que 2 tonnes d'alumine (sur 36 tonnes d'aluminium initialement introduit) s'agglomèrent ainsi à la sortie du moteur d'Ariane, pour comprendre les enjeux d'une meilleure connaissance des trajectoires des particules. Ce phénomène de dépôt est renforcé par l'adjonction volontaire au combustible de particules solides permettant de limiter les instabilités au sein du moteur. La méthode la plus simple, largement utilisée dans les milieux d'ingénierie, consiste à suivre par un traitement lagrangien les trajectoires des particules, en considérant que l'écoulement gazeux porteur est stationnaire, c'est à dire en négligeant toute rétroaction des particules sur l'écoulement. Ceci donne de bons résultats en première approximation, mais on a recours à des méthodes Eulériennes pour examiner plus en détail la répartition des particules.

Pour une concentration faible en particules, on ne garde comme couplage entre le fluide et les particules que la force de trainée. Cela donne de bons résultats pour prédire les modes d'instabilité au sein de la chambre de combustion. En particulier, c'est suffisant pour retrouver l'émission tourbillonnaire dûe à un processus de type couche de mélange. Par collision des tourbillons sur la tuyère, on excite des modes acoustiques. L'étude linéaire utilisée jusqu'ici prédisait que des particules de tailles très différentes peuvent avoir des taux d'amortissement acoustiques égaux (courbe en cloche). Les simulations Eulériennes devraient permettre de prendre en compte la différence de comportement hydrodynamique pour ces particules de rayons différents, et donc de préciser le spectre d'absorption des fréquences en présence de particules.

7.2. Applications des méthodes de suivi ou de capture d'interface.

Les méthodes de suivi d'interface comme celle de Glimm sont plutôt utilisées pour des études universitaires nécessitant une grande précision, Pour les applications, on préfère recourir à une représentation Eulérienne des diverses grandeurs, en repérant chacune des phases par des marqueurs en volume ou des fonctions continues de fraction volumique (capture d'interface).

Signalons que certaines applications faisant intervenir par exemple une surface libre ne nécessitent pas forcément sa représentation explicite. Pour étudier les écoulements en mer, en rivière ou en estuaire, EDF a développé un code appelé TELEMAC–2D [78]. Celui-ci représente le champ de vitesse horizontal en utilisant l'approximation d'eau peu profonde (équations de De Saint-Venant), et ne prend en compte la direction verticale qu'en calculant en tout point la hauteur de liquide h. Pour le code tridimensionnel correspondant, TELEMAC–3D, le domaine de calcul évolue avec le temps [79]. La hauteur h est évaluée d'après le calcul bidimensionnel, le volume est remaillé en conséquence, et le calcul tridimensionnel est effectué à domaine fixé, avant de recommencer le processus.

Ce code est utilisé pour étudier la dilution des rejets thermiques des centrales nucléaires, ou encore les problèmes de sédimentation dans les prises d'eau des centrales nucléaires en bord de mer. Il a été étendu récemment à la simulation de bancs découvrants. Dans les zones sèches, les équations sont modifiées par annulation des termes désormais inutiles, puis on résoud les équations partout. Toute la difficulté, dont la solution a requis un travail de plusieurs années, consiste à trouver un bon critère pour décider si une cellule est sèche ou non. Il n'est en effet pas suffisant de se baser uniquement sur l'annulation de la hauteur d'eau h. Cette innovation permettra d'étudier des phénomènes tels que les inondations ou ruptures de barrages.

Le CEA consacre une part de ses recherches à l'étude de l'instabilité de Richtmeyer-Meshkov. Elle se produit lorsqu'une onde de choc arrive sur une interface entre deux fluides, ou sur une discontinuité de densité. Des zones de vorticité importantes se créent. Elles sont le siège d'instabilités de type Kelvin-Helmholtz. Un meilleur contrôle de ces instabilités requiert une connaissance plus approfondie des mécanismes de déstabilisation.

Les codes de calcul du CEA appliqués à ce problème suivent la position de chaque phase à l'aide d'une fonction de concentration continue, pour laquelle on écrit une équation de convection-diffusion (cf section 4.2.). Après avoir beaucoup augmenté la résolution spatiale, ce qui est bien sûr coûteux en temps de calcul, les efforts actuels portent essentiellement sur une augmentation de l'ordre du schéma utilisé pour résoudre les équations de Navier-Stokes en dehors de l'interface (ordre 4 au lieu de 2). Au niveau de l'interface, le schéma est seulement d'ordre 1. On utilise des schémas TVB (variation totale bornée), de façon à éviter la génération d'instabilités de calcul au niveau des interfaces. Le développement de la largeur de l'interface au cours du temps est du même ordre de grandeur que celui observé dans des expériences menées conjointement. Cependant, l'interface numérique est systématiquement plus large que son homologue expérimental. En effet les simulations ne modèlisent pas la tension de surface et une diffusion excessive élargit l'interface. Une prochaine amélioration du code portera donc sur la prise en compte de la tension superficielle. Ce code inclut une modélisation de la turbulence. Pour chaque nouvelle phase fluide ajoutée, une nouvelle relation de fermeture doit être fournie, en plus des classiques relations type $k - \epsilon$.

L'instabilité de Rayleigh-Taylor a de fortes similitudes avec celle de Richtmeyer-Meshkov en ce sens que toutes deux font intervenir de forts gradients de densité. Aussi les deux sont-elles étudiées en parallèle. Les applications de l'instabilité de Richtmeyer-Meshkov sont évidentes dans le domaine de l'armement, mais cette instabilité peut également être produite par les ondes de chocs générées à l'arrière des avions. En astronomie, des instabilités peuvent naître sur les frontières des nuages de gaz denses participant à la formation des étoiles. Ceux-ci se déplacent à grande vitesse dans du gaz ionisé peu dense, favorisant des instabilités de Kelvin-Helmholtz au niveau des forts gradients de densité de l'interface.

Le CEA a également développé un code appelé C.E.E. (Couplé Euler Euler) pour simuler des écoulements de matériaux inertes dans le domaine des pressions engendrées par des explosifs puissants [80, 81, 82]. L'interface est représentée par une méthode de type SLIC (section 4.3.). Une surface libre est simulée en considérant le vide comme un fluide fictif.

Des méthodes de capture d'interface ont été employées à l'ONERA pour étudier les nappes de glissement, c'est-à-dire les discontinuités de vitesse, qui se produisent derrière le bord de fuite d'une aile d'avion. Ces techniques ont aussi été employées pour les jets, les écoulements hypersoniques. Dans toutes ces applications, un seul fluide est présent (l'air en général), mais il a des propriétés tellement différentes de part et d'autre de la discontinuité qu'on le traite en fait comme deux fluides distincts. Aussi bien les énergies de translation et de vibration des molécules que certaines réactions chimiques sont prises en compte [83, 84].

L'ONERA a également effectué il y a quelques années des simulations de jets en 3 dimensions, basées sur une méthode inverse pour simuler les équations d'Euler [85]. Un maillage adaptatif permet de suivre à chaque pas de temps la surface libre. Dans un second temps, le code devait simuler le couplage du jet avec un écoulement externe.

De façon générale, il semblerait que les méthodes pourtant relativement simples de type VOF ne soient encore que très peu utilisées en dehors des milieux universitaires. L'ordre global des schémas de simulation étant mis à mal essentiellement au niveau des interfaces, il semblerait pourtant prioritaire d'améliorer les techniques de simulation des interfaces en prenant en compte les avancées plus récentes en ce domaine. Celles-ci ont en effet permis de faire passer l'ordre des schémas de capture d'interface de 1 à 2, sans pour autant les compliquer de façon notable.

Un exemple de schéma de capture de front du second ordre est donné par le code SURFER présenté à la section 4.4.2.. Il a permis à G. Zanetti, C. Nardone et R. Scardovelli de simuler les oscillations d'une goutte axisymétrique initialisée avec une faible perturbation de la surface. Les différents modes d'oscillation peuvent être mesurés. De spectaculaires simulations de collisions entre deux gouttes à haut et faible nombre de Weber (qui compare les effets d'inertie à ceux de tension de surface), ou encore la chute d'une goutte sur un plan d'eau, ont été réalisées [86]. Elles devraient permettre de mieux comprendre l'éclatement des gouttes lors d'impacts mettant en jeu des énergies élevées.

J.F. Estrade, sous la direction de C. Kharif et S. Zaleski, a commencé à appliquer une variante de SURFER à l'étude du déferlement des vagues [87]. L'enjeu, qui intéresse les météorologistes, est de déterminer la vitesse du vent à partir de mesures de rétrodiffusion à la surface de l'océan, prises par satellite, et qui donnent des indications sur le régime de déferlement des vagues. Ce travail n'en est encore qu'à un stade très préliminaire.

Le code SURFER couplé à une représentation par pans coupés de l'interface (cf. section 4.5.) a permis de simuler l'atomisation qui se produit à la frontière d'un jet fluide dans un autre fluide. Sous l'effet du cisaillement intense qui se produit à l'interface, des gouttes de fluide sont arrachées [30] (Figure 7). De tels jets se rencontrent dans les moteurs de fusée. En augmentant l'aire de l'interface entre les fluides, le taux d'atomisation a une influence importante sur le mélange des combustible, et donc le rendement du moteur, mais aussi la production de substances toxiques telles que NO_x ou CO. Par rapport à la théorie, les simulations permettent de prendre en compte les non-linéarités, qui sont évidemment très importantes dans ce problème. Dans l'avenir, des réactions chimiques devraient être incorporées au code SURFER, permettant de simuler non seulement l'atomisation mais aussi l'évaporation elle-même des gouttelettes.

Figure 7: *Simulation de rupture d'interface par cisaillement réalisée avec le code SURFER (Figure extraite de [30]) pour un rapport de densités égal à 10, un nombre de Reynolds de 7500 et un nombre de Weber de 150. Les zones noires représentent le liquide et les lignes sont des isocontours de la vorticité.*

8. Comparaison des méthodes et perspectives.

Essayons maintenant de faire ressortir les avantages ou points faibles des diverses méthodes ainsi que leurs domaines d'application privilégiés.

• L'étude des écoulements à bulles en présence de cisaillement reste une question ouverte importante que les approches présentées dans la première partie de ce rapport permettent d'aborder de façon statistique. En particulier la description lagrangienne de la phase dispersée (section 2.3.) a permis de prendre en compte les caractéristiques géométriques de l'écoulement.

Comme on l'a vu, toutes ces représentations de l'écoulement doivent être complétées par des données obtenues indépendamment sur la forme des particules et la topologie de l'écoulement, et par des relations constitutives donnant la force de traînée qui s'exerce sur les particules fluides, voire la viscosité de la suspension, etc. Bon nombre de ces informations complémentaires sont fournies par des expériences. Cependant, si la structure géométrique d'un écoulement est assez simplement accessible par l'expérience, la détermination de corrélations ou de relations constitutives est beaucoup plus difficile.

Aussi a-t-on aujourd'hui de plus en plus recours à des simulations numériques à l'échelle microscopique pour déterminer des relations complémentaires. Les méthodes de dynamique moléculaire ou de gaz sur réseau s'avèrent précieuses dans cette perspective de recherche, en particulier pour les mesures de corrélations [88, 89].

Pour nombre de problèmes, on n'est pas dans le cas où l'une des phases est très dispersée dans l'autre, et d'autres approches doivent être envisagées.

• Les méthodes de suivi d'interface ont l'avantage d'être précises au second ordre. L'emploi d'un maillage curviligne qui suit exactement l'interface permet d'écrire précisement les conditions aux limites. Par contre, les changements de topologie de l'interface qui interviennent lorsque deux domaines de la même phase fusionnent, ou qu'un domaine se sépare en deux parties, sont difficiles à traiter par ces méthodes, et ce d'autant plus que la dimension d'espace augmente. En 3 dimensions, on préférera une autre approche.

On conseillera d'employer les méthodes de suivi d'interface pour des problèmes ayant une structure géométrique simple, faisant intervenir seulement une ou deux interfaces, et pour lesquels une grande précision est requise. Appliquées à l'instabilité de Rayleigh-Taylor par Glimm & al, les méthodes de suivi d'interfaces ont donné de bons résultats [90, 91]. Elles ont aussi été employées avec succès pour étudier l'interaction d'une goutte avec une surface libre ou la coalescence de deux gouttes par exemple. Il serait intéressant de savoir comment l'interaction modifie le champ hydrodynamique autour de la bulle, notamment comment la couche limite se trouve perturbée.

• Pour des problèmes globaux où de nombreuses interfaces sont mises en jeu, on aura plutôt recours aux schémas de Boltzmann ou aux méthodes de capture d'interface. Ces deux approches effectuent spontanément la reconnexion des interfaces, sans qu'un traitement particulier soit requis. L'extension à trois dimensions ne pose pas de difficulté particulière. L'emploi de ces méthodes est conseillé lorsque l'on n'a pas besoin d'une précision très élevée sur les résultats, pour des interfaces abondantes à géométrie complexe.

L'un des points forts de la méthode de Boltzmann reste la facilité à définir les conditions aux limites. Elle sera donc indiquée pour des écoulements dans des matrices solides compliquées de type milieu poreux. Par construction, elle conserve exactement la masse et la quantité de mouvement. Il a été montré dans le cas du mélange de deux fluides non miscibles de densités différentes que la condition de continuité de la vitesse tangentielle est remplacée par celle de la quantité de mouvement [61]. Des études complémentaires sur les conditions de saut sur l'interface sont encore nécessaires.

Les méthodes de capture d'interface étaient jusqu'ici parasitées par de nombreuses sources d'erreurs, en particulier par une diffusion des interfaces qui conduisait –à l'extrême– à la disparition de ces dernières. Une interface en mouvement avait tendance à laisser des débris derrière elle. Pour corriger ces défauts, les remèdes apportés jusqu'à récemment brisaient la conservation exacte de la masse. Les nouvelles solutions proposées n'ont pas cet inconvénient et rendent les méthodes de capture de front tout à fait compétitives avec les méthodes de Boltzmann, voire plus performantes car plus rapides à simuler grâce en particulier aux méthodes multigrilles. Cette dernière remarque doit être nuancée par le fait que les méthodes multigrilles –et donc de capture de front– sont difficilement exportables sur ordinateur parallèle, alors que les méthodes de Boltzmann sont facilement parallèlisables. Remarquons aussi que les codes à capture de front les meilleurs sont écrits pour des mélanges de fluides ayant des densités comparables. Des progrès doivent encore être effectués dans le cas de grands rapports de densité, et pour des fluides compressibles. Néanmoins, l'approche par capture de front devrait connaître un grand essor dans les années à venir.

Remerciements

L'auteur tient à remercier Stéphane Zaleski et Dominique d'Humières pour leur aide dans la rédaction de ce manuscrit, ainsi que Pierre Lallemand et Yves Pomeau pour leur critique constructive.

Références

[1] G. Amberg and M. Ungarish. Spin-up from rest of a mixture: numerical simulation and asymptotic theory. *J. Fluid Mech.*, 246:443–464, 1993.

[2] M. Ishii. *Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow.* Eyrolles, 1975.

[3] M. Ishii and N. Zuber. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particle flows. *AIChE J.*, 25:843–854, 1979.

[4] G.R. Ruetsch and E. Meiburg. On the motion of small spherical bubbles in two-dimensional vortical flows. *Phys. Fluids A*, 5:2326, 1993.

[5] A.J. Szeri and L.G. Leal. A new computational method for the solution of flow problems of microstructured fluids. part 2. inhomogeneous shear flow of a suspension. *J. Fluid Mech.*, 262:171–204, 1994.

[6] J.A. Trapp and G.A. Mortensen. A discrete particle model for bubble-slug two-phase flows. *J. Comput. Physics*, 107:367–377, 1993.

[7] J.H. Stuhmiller, R.E. Ferguson, and C.A. Meister. *Electric Power Research Institute Report NP-6557*, Nov. 1989.

[8] J. Fabre and A. Liné. Modeling of two-phase slug flow. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 24:21–46, 1992.

[9] Z-S. Mao and A.E. Dukler. The motion of Taylor bubbles in vertical tubes. I. A numerical simulation for the shape and rise velocity of Taylor bubbles in stagnant and flowing liquid. *J. Comput. Physics*, 91:132–160, 1990.

[10] J. M. Floryan and H. Rasmussen. Numerical methods for viscous flows with moving boundaries. *Appl. Mech. Rev.*, 42:323–340, 1989.

[11] James M. Hyman. Numerical methods for tracking interfaces. *Physica*, D 12:396–407, 1984.

[12] I-L. Chern, J. Glimm, O. McBryan, B. Plohr, and S. Yaniv. Front tracking for gas dynamics. *J. Comput. Physics*, 62:83–110, 1986.

[13] J.W. Grove, R. Holmes, D.H. Sharp, Y. Yang, and Q. Zhang. Quantitative theory of Richtmyer-Meshkov instability. *Phys. Rev. Lett.*, 71:3473, 1993.

[14] T. Lappas, A. Leonard, and P. E. Dimotakis. An adaptive Lagrangian method for computing 1D reacting and non-reacting flows. *J. Comput. Physics*, 104:361–376, 1993.

[15] A. Harten and J. Hyman. Self-adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Physics*, 50:235–269, 1983.

[16] F. Raymond. Simulation numérique de l'écoulement autour d'une bulle déformable. *Communication orale au GDR Mécanique des Fluides Numérique, au LMM (Paris 6)*, 5 Mai 1994.

[17] J. Magnaudet. private communication. 1994.

[18] J.J. Monaghan. Simulating free surface flows with SPH. *J. Comp. Phys.*, 110:399–406, 1994.

[19] F.H. Harlow and J.E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The Physics of Fluids*, 8:2182, 1965.

[20] B.D. Nichols and C.W. Hirt. Improved free surface boundary conditions for numerical incompressible-flow calculations. *J. Comput. Physics*, 8:434–448, 1971.

[21] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *J. Comput. Physics*, 79:12–49, 1988.

[22] W. Mulder, S. Osher, and J.A. Sethian. Computing interface motion in compressible gas dynamics. *J. Comp. Phys.*, 100:209, 1992.

[23] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comp. Phys.*, 114:146, 1994.

[24] C.W. Hirt and B.D. Nicholls. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Physics*, 39:201–225, 1981.

[25] W.F. Noh and P. Woodward. SLIC (Simple Line Interface Calculation). In A.I. van de Vooren and P.J. Zandbergen, editors, *Proc. Fifth Int. Conf. on Numerical Methods in Fluid Mechanics*, pages Lecture Notes in Physics, vol. **59**. Springer Berlin, 1976.

[26] A.J. Chorin. Curvature and solidification. *J. Comput. Physics*, 57:472, 1985.

[27] Poo and Ashgriz. A computational method for determining curvatures. *J. Comput. Physics*, 84, Notes:483–491, 1989.

[28] Ashgriz and Poo. Flair: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *J. Comput. Physics*, 93:449–468, 1991.

[29] J. Li and S. Zaleski. *Private communication*, 1994.

[30] F.X. Keller, J. Li, A. Vallet, D. Vandromme, and S. Zaleski. Direct numerical simulation of interface breakup and atomisation. *ICLASS-94 Rouen, France*, I-8:56, July 1994.

[31] S. Zaleski. private communication. 1994.

[32] W.L. Briggs. *A multigrid tutorial.* SIAM (Philadelphia, Penn), 1987.

[33] W.H. Press and S.A. Teukolsky. Multigrid methods for boundary value problems I. *Computers in Physics*, Sept-Oct 1991, 1991.

[34] Uriel Frisch, B. Hasslacher, and Yves Pomeau. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Phys. Rev. Lett.*, 56:1505–1508, 1986.

[35] U. Frisch, D. d'Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau, and J.P. Rivet. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex Systems*, 1:649–707, 1987.

[36] D. d'Humières, P. Lallemand, and U. Frisch. Lattice gas models for 3D hydrodynamics. *Europhys. Lett.*, 2:291–297, 1986.

[37] J. A. Somers and P. C. Rem. Obtaining numerical results from the 3D FCHC-lattice gas. *Lecture Notes in Physics*, 398:59–78, 1992.

[38] André Clouqueur and Dominique d'Humières. R.A.P., a family of cellular automaton machines for fluid dynamics. *Helvetica Physica Acta ; Birkhauser Verlag, Basel*, 62, 1989.

[39] Tommaso Toffoli and Norman Margolus. Programmable matter : Concepts and realization. *Physica*, D 47:263, 1991.

[40] Rémi Cornubert, Dominique d'Humières, and David Levermore. A Knudsen layer theory for lattice gases. *Physica*, D 47:241–259, 1991.

[41] Rémi Cornubert. *Conditions aux limites des modèles cinétiques discrets : couche de Knudsen et obstacles.* Thèse de Doctorat de Paris VI, 1991.

[42] D. H. Rothman and S. Zaleski. Lattice-gas models of phase separation: interfaces, phase transitions, and multiphase flow. *Reviews of Modern Physics*, 66:1417–1479, 1994.

[43] D.H Rothman and J. M. Keller. Immiscible cellular-automaton fluids. *J. Stat. Phys.*, 52:1119–1127, 1988.

[44] C. Appert, V. Pot, and S. Zaleski. Liquid-gas models on 2D and 3D lattices. In A. Lawniczak and R. Kapral, editors, *Pattern Formation and Lattice-Gas Automata*. American Mathematical Society, Providence RI, in press 1995.

[45] J. Olson. A two-phase lattice gas in three dimensions. *MIT Report 5*, page 1, 1993.

[46] C. Appert, D. Rothman, and S. Zaleski. A liquid gas model on a lattice. *Physica*, D 47:85, 1991.

[47] Jean Pierre Rivet. Spontaneous symmetry breaking in the 3-D wake of a long cylinder, simulated by the lattice gas method. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 313:151–157, 1991.

[48] D. d'Humières and R. Cornubert. Flow past a symmetric back-facing step using lattice-boltzmann equations. *preprint*, 1993.

[49] A. Cancelliere, C. Chang, E. Foti, D. Rothman, and S. Succi. The permeability of a random medium: comparisons of simulation with theory. *Phys. Fluids A*, 2:2085–2088, 1990.

[50] Daniel H. Rothman and Stéphane Zaleski. Spinodal decomposition in a lattice-gas automaton. *J. de Phys. - France*, 50:2161–2174, 1989.

[51] C. Adler, D. d'Humières, and D. H. Rothman. Surface tension and interface fluctuations in immiscible lattice gases. *J. Phys. I France*, 4:29–46, 1994.

[52] D. H Rothman. Simple models of complex fluids. In M. Mareschal and B. Holian, editors, *Microscopic simulations of complex hydrodynamics*, pages 221–238. Plenum Press, 1992.

[53] D. H. Rothman and L.Kadanoff. Bubble, bubble, boil and trouble. *Computers in Physics*, 8:199, 1994.

[54] C. Appert and S. Zaleski. Dynamical liquid-gas phase transition. *J. de Phys. - France*, II 3:309–337, 1993.

[55] C. Appert and D. d'Humières. Density profiles in a diphasic lattice gas model. *to appear in PRE*, 1995.

[56] V. Pot, C. Appert, A. Melayah, D. H. Rothman, and S. Zaleski. Modelling water flow in unsaturated porous media by interacting lattice gases–cellular automata: I. Evaporation. *submitted to Water Resources Research*, 1994.

[57] D.O. Martinez, W.H. Matthaeus, S. Chen, and D. Montgomery. Comparison of spectral method and lattice boltzmann simulations of two-dimensional hydrodynamics. *to appear in Physics of Fluids A*, 1994.

[58] Andrew K. Gunstensen and Dan H. Rothman. Microscopic modeling of immiscible fluids in three dimensions by a lattice Boltzmann method. *Europhys. Lett.*, 18:157–161, 1992.

[59] R. B. Rybka, M. Cieplak, D. Salin, and J. R. Banavar. Boltzmann cellular automata studies of the spinodal decomposition. *preprint*, 1994.

[60] X. Shan and H. Chen. Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys. Rev. E*, 47:1815–1819, 1993.

[61] Irana Ginzbourg. *Les problèmes de conditions aux limites dans les méthodes de gaz sur réseaux à plusieurs phases.* PhD thesis, 1994.

[62] R.E. Caflisch and S. Semmes. A nonlinear approximation for vortex sheet evolution and singularity formation. *Physica*, D 41:197–207, 1990.

[63] R.H. Rangel and W.A. Sirignano. Nonlinear growth of kelvin-helmholtz instability: Effect of surface tension and density ratio. *Phys. Fluids*, 31:1845, 1988.

[64] P. Camatte, J. Cousin, M. Ledoux, and P. Versaevel. Instability of a gas-liquid interface: non-linear effects. In A.J. Yule and C. Dumouchel, editors, *ICLASS-94 Rouen, France,* 6^{th} *International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, page Paper I5. Begell House, Inc. New-York, Wallingford (UK), July 1994.

[65] O.A. Ladyzhenskaya. *Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow.* Gordon & Breach, New York, 2nd ed., 1969.

[66] Wim S.J. Uijttewaal, Evert-Jan Nijhof, and Robert M. Heelthaar. Droplet migration, deformation, and orientation in the presence of a plane wall: A numerical study compared with analytical theories. *Phys. Fluids A*, 5:819, 1993.

[67] T. Palermo. Le phénomène de coalescence – Etude bibliographique. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 46:325, 1991.

[68] A.L. Bertozzi and M. Pugh. The lubrification approximation for thin viscous films : regularity and long time behavior of weak solutions. *preprint*, 1994.

[69] A. Shinozaki and Y. Oono. Spinodal decomposition in 3D-space. *Phys. Reports*, 48:2622–2654, 1993.

[70] S. Puri and B. Dünweg. Temporally linear domain growth in the segregation of binary fluids. *Phys. Rev. A*, 45:R6977, 1992.

[71] O. T. Valls and J. E. Farrell. Spinodal decomposition in a three-dimensional fluid model. *Phys. Reports*, 47:R36, 1993.

[72] E.D. Siggia. Late stages of spinodal decomposition in binary mixtures. *Phys. Rev. A*, 20:595–605, 1979.

[73] A.J. Chorin. Flame advection and propagation algorithms. *J. Comput. Physics*, 35:1–11, 1980.

[74] Carlo Cercignani. On the thermodynamics of a discrete velocity gas. Transport Theory and Statistical Physics - *Proceedings of Euromech 287 - Discrete Models in Fluid Dynamics*, 23:1–8, 1994. Editor P. Nelson.

[75] Recherche et Developpement E.D.F. Outstanding events. 1992.

[76] Recherche et Developpement E.D.F. Outstanding events. 1993.

[77] Sami Abid. *Expériences physiques et numériques de coalescence entre deux gouttes immergées dans un autre liquide*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, Février 1993.

[78] J.-M. Hervouet, J.-M. Janin, and C. Moulin. Preconditioning and solving linear systems for the computation of free surface flows. *Rapport EDF-DER*, HE-43/94/043/A, 1994.

[79] J.-M. Hervouet, J.-L. Hubert, J.-M. Janin, F. Lepeintre, and E. Peltier. The computation of free surface flows with telemac, an exemple of evolution towards hydroinformatics. *Rapport EDF-DER*, HE-43/94/046/A, 1994.

[80] N. Legrand and J. Ovadia. Code eulérien d'hydrodynamique C.E.E. I-aspect physico-numérique. *Rapport interne C.E.A.*, 1977.

[81] N. Legrand and J. Ovadia. Code eulérien d'hydrodynamique C.E.E. II-aspect informatique. *Rapport interne C.E.A.*, 1978.

[82] N. Legrand and J. Ovadia. Calcul d'écoulements engendrés par explosif dans les milieux inertes au moyen du code C.E.E. *Rapport interne C.E.A.*

[83] F. Coquel, C. Flament, V. Joly, and C. Marmignon. Viscous nonequilibrium flow calculations. *ONERA Rapport Interne*, Numéro 1992 - 89.

[84] V. Joly, F. Coquel, C. Marmignon, W. Aretz, S. Metz, and H. Wilhelmi. Numerical modelling of heat transfer and relaxation in nonequilibrium air at hypersonic speeds. *La Recherche Aérospaciale*, 3:219–234, 1994.

[85] V. Couaillier and J.P. Veuillot. Inverse method for the Euler equations. *ICIDES II Pennsylvanie*, 167, 26-28 Octobre 1987.

[86] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *J. Comput. Physics*, 113:134, 1994.

[87] C. Kharif. Sur le problème du déferlement des ondes de surface. *Communication orale au GDR Mécanique des Fluides Numérique, au LMM (Paris 6)*, 5 Mai 1994.

[88] M. H. Ernst and J. W. Dufty. Hydrodynamics and time correlation functions for cellular automata. *J. Stat. Phys.*, 58:57–86, 1990.

[89] Patrick Grosfils, Jean-Pierre Boon, and Pierre Lallemand. Spontaneous fluctuation correlations in thermal lattice-gas automata. *Phys. Rev. Lett.*, 68:1077–1080, 1992.

[90] Y. Chen, Y. Deng, J. Glimm, G. Li, Q. Zhang, and D. Sharp. A renormalization group scaling analysis for compressible two-phase flow. *Phys. Fluids A*, 5:2929, 1993.

[91] J. Glimm, X.L. Li, R. Menikoff, D.H. Sharp, and Q. Zhang. A numerical study of bubble interactions in rayleigh-taylor instability for compressible fluids. *Phys. Fluids A*, 2:2046, 1990.

Liste de laboratoires.

Cette liste ne prétend pas être exhaustive. Les laboratoires cités ci-dessous le sont pour avoir joué un rôle dans le développement des modèles multiphasiques au sein de la communauté scientifique. Pour faciliter d'éventuels contacts, des noms de chercheurs travaillant dans ces laboratoires sur le sujet qui nous intéresse ici ont été donnés à titre indicatif.

FRANCE

- ASCI, Bat 506, Université Paris Sud 91 405 ORSAY Cedex
  D. d'Humières et P. Lallemand
  email: dominiq@physique.ens.fr ; lalleman@asci.fr
- Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris
  Centre de Mise en Forme des Matériaux, CNRS URA 1374
  Sophia Antipolis, Rue Claude Daunesse 06560 Valbonne
  M. Bellet et J.L. Chenot
- Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, U.A. D 0005 CNRS
  Allée du Professeur Camille Soula 31 400 Toulouse
  J. Fabre
  Tél: (33-1) 61 28 58 10, Fax: (33-1) 61 28 58 99
- Institut de Mécanique Statistique de la Turbulence
  12 Avenue Général Leclerc 13003 Marseille
  Christian Kharif
- Institut Méditerranéen de Technologie
  Technopôle de Château Gombert 13451 Marseille Cedex 20
  Dominique Morvan
- Laboratoire de Mécanique des Fluides
  Division Mécanique Energétique et Environnement
  Ecole Centrale de Nantes, 1 rue de la Noe 44072 Nantes Cedex 03
  Franck Raymond
  fax: (33)40747406; email: franck.raymond@ec-nantes.fr
- Laboratoire de Mécanique des Fluides numérique, CORIA, CNRS, URA 230
  INSA de Rouen, BP 8, 76131 Mont Saint Aignan
  D. Vandromme, M. Ledoux
  fax: (33) 35 52 84 21; email: Dany.Vandromme@crihan.fr
- Laboratoire de Modélisation en Mécanique, CNRS, Université Pierre et Marie Curie
  Tour 66, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05

Stéphane Zaleski
email: zaleski@laplace.lmm.jussieu.fr

- Laboratoire d'énergétique moléculaire et macroscopique, combustion (EMC2),
  Ecole Centrale de Paris, Grande Voie des Vignes
  92295 Chatenay-Malabry Cedex
  Sébastien Candel
  Tél: (33-1) 41 13 10 32, Fax: (33-1) 47 02 80 35
- Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure
  24 rue Lhomond 75231 PARIS Cedex 05
  Dominique d'Humières, Cécile Appert
  Tél: (33-1) 44 32 34 75, Fax: (33-1) 44 32 34 33
  email: dominiq@physique.ens.fr, appert@physique.ens.fr
- Laboratoire National d'Hydraulique, EDF
  6, Quai Watier 78400 Chatou
  Jean-Michel Hervouet
  Tél: (33-1) 30 71 80 18, Fax: (33-1) 30 71 80 86
- ONERA
  29 Av. Division Leclerc 92 320 Châtillon
  Jean-Pierre Veuillot (Resp. Div. Aérodynamique)
  Tél: (33-1) 46 73 40 40
- Service mathématique et codes numériques
  CEA de Limeil-Valenton 94 195 Villeuneuve-St-Georges Cedex
  Philippe Loreaux, Didier Bénard
  Tél: (33-1) 45 95 65 48
- Société Nationale des Poudres et Explosifs
  B. P. 2, 91 710 Vert-le-Petit
  Pierre-Yves Tissier (CRB)
  Tél: (33-1) 64 99 12 84, Fax: (33-1) 64 99 11 18

BELGIQUE

- Physique Non-Linéaire et Mécanique Statistique
  Université libre de Bruxelles
  Campus Plaine CP 231, 1050 Bruxelles, Belgique
  Jean-Pierre Boon
  Tél: 32 2 650 5527, Fax: 32 2 650 5767
  email: jpboon@ulb.ac.be

ÉTATS-UNIS

- Colorado and Idaho National Engineering Laboratory
  Denver, University of Colorado, Idaho falls, Idaho 83415, USA
  John A. Trapp
- Courant Institute of Mathematical Sciences
  New York University, New York, NY 10012, USA
  Mary Pugh
  email: pugh@aloss.cims.nyu.edu
- Dept. of Applied Mathematics, State University of New York at Stony Brook
  Stony Brook, NY 11794-3600, USA
  J. Glimm et Q. Zhang
- Dept. of Chemical Engineering, University of Delaware, Newark, Delaware 19716, USA
  J.R. Richards, A.N. Beris et A.M. Lenhoff
- Dept. of Mathematics, Univ. of California, Los Angeles, California 90024, USA
  S. Osher
- Dept. of Mathematics, Univ. of California, Berkeley, California 94720, USA
  J.A. Sethian, A.J. Chorin
- Dept. of Mathematics, Univ. of Chicago, Chicago, Illinois 60637 , USA
  A.L. Bertozzi, email : bertozzi@math.uchicago.edu
- Dept. of Mechanical and Aerospace Engineering
  State University of New York at Buffalo, Buffalo, New York 14260, USA
  N. Ashgriz et J.Y. Poo
- Dept. of Mechanical and Aerospace Engineering
  University of California, Irvine, CA 92717, USA
  R.H.Rangel
- Dept. Mech. Eng. and Appl. Mech., University of Michigan
  304 Auto Lab, Ann Arbor, Michigan 49109, USA
  G. Tryggvason
- Graduate Aeronautical Laboratories, California Institute of Technology
  Pasadena, CA 91125, USA
  T. Lappas, A. Leonard, P.E. Dimotakis
- Idaho National Engineering Laboratory, EG & G Idaho, Inc.
  Idaho falls, Idaho 83415, USA
  Glen A. Mortensen
- Lawrence Livermore Laboratory, University of California
  Livermore, California 94550, USA
  W.F. Noh et Paul Woodward

- Mathematics Dept., Rice University, Houston, TX 77251, USA
  Stephen Semmes
- Science Applications, Inc.
  P.O. Box 2351, La jolla, CA 92037, USA
- Theoretical Division, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545, USA
  Gary D. Doolen, D.H. Sharp et R. Menikoff
  email : gary@goshawk.lanl.gov
- UCLA
  Russel E. Caflisch
  email : caflisch@math.ucla.edu

ISRAËL

- Dept. of Computer Science, Technion-Israel Institute of Technology
  Haifa 32000, Israël
  M. Ungarish

ITALIE

- CRS4 (Center for Advanced Studies and Research in Sardinia)
  Via N. Sauro, 10, 09123 Cagliari, Italy
  Gianluigi Zanetti

JAPON

- Dept. of Chemical Engineering, Kyushu University, Hakozaki, Fukuoka 812, Japan
  S. Komori, R. Nagaosa, Y. Murakami
- Institution of Computational Fluid Dynamics, Haramachi, Tokyo 152, Japan
  S. Chiba, K. Ishii, K. Kuwahara

PAYS-BAS

- Dept. of Medical and Physiological Physics
  Univ. of Utrecht, University Hospital H.02.101
  P.O. Box 85500, 3508 GA Utrecht, Pays-Bas
  Wim S.J. Uijttewaal, Evert-Jan Nijhof, Robert M. Heelthaar

- Instituut voor Theoretische Fysica, Univ. Utrecht
  Princeton Plein 5, Postbus 80 006, 3508 TA Utrecht, Pays-Bas
  Matthieu H. Ernst
  Tél: (31) 30 533060, Fax: (31) 30 531137
  email: ernst@fys.ruu.nl
- Koninklijke/Shell Exploratien en Produktie Laboraturium
  Rijswijk (Z-H), Pays-Bas
  W. Mulder

SUÈDE

- Dept. of Hydrodynamics, Royal Institute of Technology, S-100 44 Stockholm, Sweden
  G. Amberg