

Soutenance de Thèse

Modélisation, étude mathématique et simulation des collisions dans les fluides complexes

Céline Baranger

Directeur de thèse : Laurent Desvillettes

CMLA, ENS de Cachan & UMR 8536 du CNRS



CEA/DIF Bruyères-le-Châtel



Contenu

I Description des fluides complexes (sprays)

Contenu

I Description des fluides complexes (sprays)

II Modélisation des sprays

- Écriture précise des noyaux de collisions/coalescences et fragmentations, le modèle T.A.B.
- Modèle de fragmentation de gouttelettes à nombre de Weber élevé

Contenu

I Description des fluides complexes (sprays)

II Modélisation des sprays

- Écriture précise des noyaux de collisions/coalescences et fragmentations, le modèle T.A.B.
- Modèle de fragmentation de gouttelettes à nombre de Weber élevé

III Étude mathématique d'un couplage fluide-cinétique

- Résultat d'existence pour Vlasov - Euler isentropique

Contenu

I Description des fluides complexes (sprays)

II Modélisation des sprays

- Écriture précise des noyaux de collisions/coalescences et fragmentations, le modèle T.A.B.
- Modèle de fragmentation de gouttelettes à nombre de Weber élevé

III Étude mathématique d'un couplage fluide-cinétique

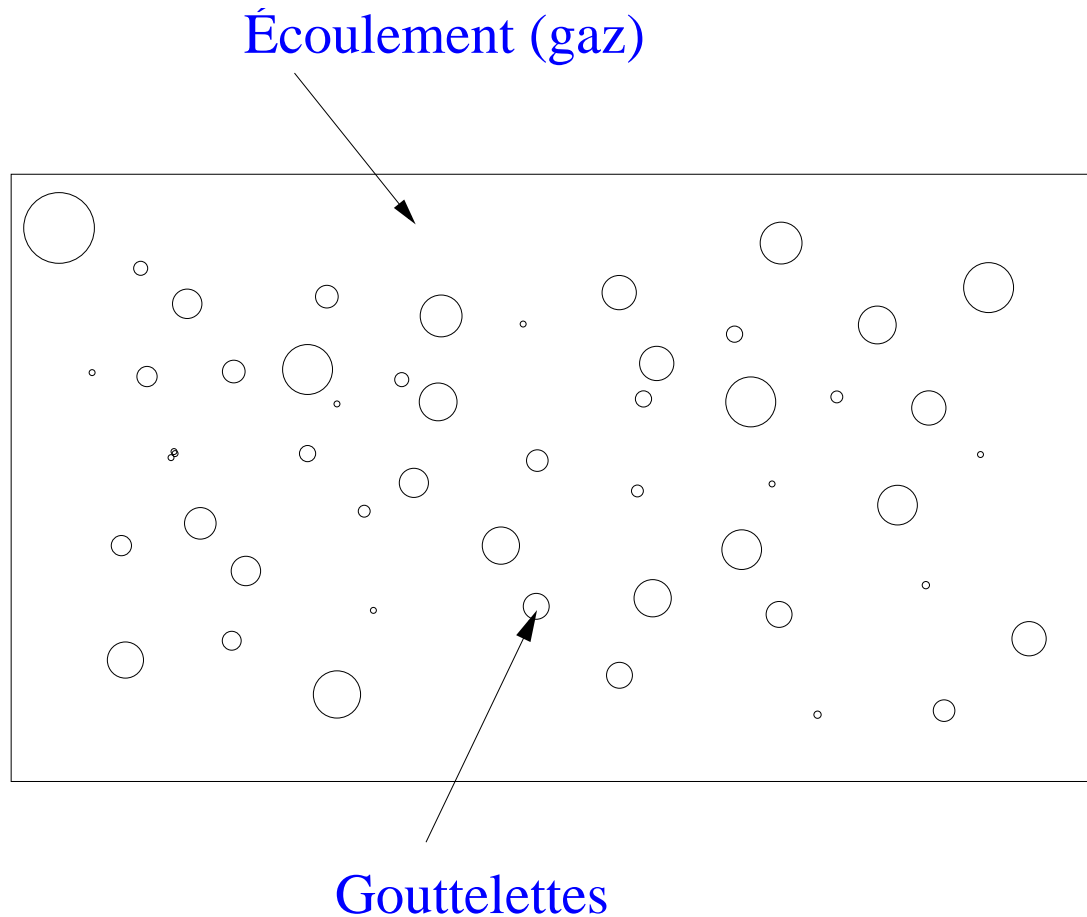
- Résultat d'existence pour Vlasov - Euler isentropique

IV Simulations numériques

- Collisions dans un code du CEA

Description des sprays

Les sprays = gaz avec gouttelettes en suspension



Sprays : le fluide environnant

- Fluide environnant : décrit par la mécanique des fluides

Quantités **macroscopiques** (dépendant de (t, x))

- densité $\rho(t, x)$
- vitesse $u(t, x)$
- énergie interne $I(t, x)$

Systeme fluide classique

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho u) &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla_x p &= 0, \\ \partial_t(\rho I) + \nabla_x \cdot (\rho u I) + p \nabla_x \cdot u &= 0,\end{aligned}$$

Sprays : la phase dispersée

- Phase dispersée (gouttelettes) : décrite par la théorie cinétique de Boltzmann

Fonction de **densité de probabilité** $f(t, x, v, r, \dots)$ où x position, v vitesse, r rayon

Équation cinétique

$$\partial_t f + \underbrace{\nabla_x \cdot (vf)}_{\text{terme de transport}} = \underbrace{Q(f)}_{\text{terme de collision}},$$

Sprays : équation fluide-cinétique

- Un spray (fluide + phase dispersée) est décrit par un couplage **fluide-cinétique**
- Classification des sprays

$$\partial_t(\alpha \rho) + \nabla_x \cdot (\alpha \rho u) = 0,$$

$$\partial_t(\alpha \rho u) + \nabla_x \cdot (\alpha \rho u \otimes u) + \nabla_x p = \int_{v,r} -m F f \, dv dr,$$

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (F f) = Q(f),$$

● fins

$$\alpha = 1$$

$$m F = D(u - v)$$

$$Q(f) = 0$$

● modérément épais

$$\alpha = 1$$

$$m F = D(u - v)$$

● épais

$$\alpha = 1 - \int_{v,r} \frac{4}{3} \pi r^3 f \, dv dr$$

$$m F = D(u - v) - \frac{4}{3} \pi r^3 \nabla_x p$$

Écriture précise de noyaux

But : décrire les collisions, coalescences et/ou fragmentations des gouttelettes dans un spray

● Sprays à faible nombre de Weber ($We = \frac{r \rho_g |v-u|^2}{\sigma_p}$)

● Modèle de Villedieu

● collisions/coalescences élastiques et paramètre d'impact.

● fragmentations : modèle empirique

● Code Kiva (Los Alamos) O'Rourke et al.

● fragmentations : modèle T.A.B.

⇒ Adapter le modèle de collisions/coalescences de Villedieu en y ajoutant le modèle de fragmentation T.A.B.

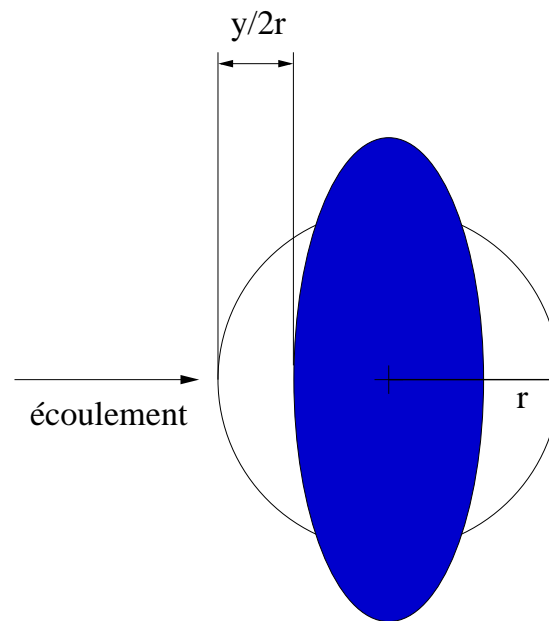
● Sprays à nombre de Weber élevé

⇒ Utilisation du modèle d'onde de Reitz

Le modèle T.A.B.

Fragmentation : Taylor Analogy Breakup

- Ajout de 2 variables : y déformation de la goutte, \dot{y} oscillation



- Équation pour y :
$$\ddot{y} = \frac{2}{3} \frac{\rho}{\rho_d} \frac{|u - v|}{r^2} - \frac{8\sigma}{\rho_d r^3} y - \frac{10\mu_d}{\rho_d r^2} \dot{y}$$
- Condition de fragmentation : $|y| = 1$.

Description cinétique

- Fonction de densité de présence : $f(t, x, v, r, T, y, \dot{y})$
- Équation cinétique

$$\partial_t f + \nabla_x \cdot (v f) + \nabla_v \cdot (F f) + \frac{\partial(\mathcal{T} f)}{\partial T} + \frac{\partial(\dot{y} f)}{\partial y} + \frac{\partial(\ddot{y} f)}{\partial \dot{y}} = Q_{coll/coal}(f) + Q_{frag}(f)$$

- échange thermique avec le gaz : \mathcal{T}
- collision et coalescence : $Q_{coll/coal}(f)$
- fragmentation : $Q_{frag}(f)$

Noyau de collision/coalescence

$$\begin{aligned}
 Q_{coll/coal}(f) = & - \int \cdots \int_{v^*, r^*, T^*, y^*, \dot{y}^*} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} f f^* B(\theta, |v - v^*|, r, r^*) \\
 & + \int \cdots \int_{v^*, r^*, T^*, y^*, \dot{y}^*} \int_{\theta=0}^{\pi-2\theta_{cr}} \int_{\phi=0}^{2\pi} f' f^{*'} B(\theta, |v - v^*|, r, r^*) \frac{\dot{y}\dot{y}^*}{\alpha^4 \dot{y}' \dot{y}^{*'}} \\
 & + \frac{1}{2} \int \cdots \int_{(v^*, r^*, T^*, y^*, \dot{y}^*) \in \mathbb{D}^*} \int_{\theta=\pi-2\theta_{cr}}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} f^* f^{\diamond} B(\theta, |v^* - v^{\diamond}|, r, r^*) \left(\frac{r}{r^{\diamond}}\right)^{21} \frac{y\dot{y}}{y^{\diamond} \dot{y}^{\diamond}},
 \end{aligned}$$

- Section efficace des sphères dures

$$B(\theta, |v - v^*|, r, r^*) = \pi |v - v^*| (r + r^*)^2 \frac{\sin \theta}{4\pi},$$

- Rebond $(') + (*') = () + (*)$,

- Coalescence $(\diamond) + (*) = ()$.

Noyau de fragmentation

$$Q_{frag}(f) = \iint_{r^*, \dot{y}^*} \int_{n \in S^1((u-v)^\perp)} b(r, r^*, \dot{y}^*, y, \dot{y}) \dot{y}^* \left(f\left(v - \frac{r^* \dot{y}^*}{2} n, r^*, T, 1, \dot{y}^*\right) - f\left(v - \frac{r^* \dot{y}^*}{2} n, r^*, T, -1, \dot{y}^*\right) \right) \frac{d\gamma}{2} dr^* d\dot{y}^* .$$

- Flux des gouttelettes à travers $|y| = 1$:
 $\dot{y}(f(y = 1) - f(y = -1))$
- Paramètres des gouttelettes produites par fragmentation :
probabilité b

Fragmentation de gouttelettes : un autre modèle

- Cemracs 2003 : projet Genjet, en collaboration avec L. Boudin
- Onde de choc dans le fluide : gouttelettes avec un nombre de Weber élevé

$$We = \frac{r \rho_g |v - u|^2}{\sigma_p} \gg 1$$

- modèle T.A.B. (Weber critique ≈ 6) \Rightarrow mal adapté
- modèle utilisé : modèle d'onde de Reitz

Instabilité aérodynamique de type Kelvin-Helmholtz

\Rightarrow perturbation de la surface de la gouttelette

\Rightarrow détachement de petites gouttelettes

Modèle d'onde de Reitz

- Longueur d'onde de la perturbation Λ , taux de croissance de la perturbation Ω
- Fréquence de fragmentation d'une gouttelette de rayon r

$$\nu = \begin{cases} 0 & \text{si } r \leq C_R \Lambda \text{ ou } We \leq \frac{1}{2} \sqrt{Re} \\ \frac{C_\nu r}{\Lambda \Omega} & \text{sinon} \end{cases}$$

- La gouttelette 'mère' perd de la masse : évolution de son rayon donnée par χ
- Taille des gouttelettes obtenues par fragmentation $\propto \Lambda$

Équation du modèle

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (fF) + \partial_r (f\chi) = Q_{Reitz}(f),$$

- Évolution du rayon des gouttelettes 'mère'

$$\chi = -\nu(t, x, v, r)(r - R),$$

- Gouttelettes générées par fragmentation

$$Q_{Reitz}(f)(v, r) = \int_{v_*, r_*} \int_{\mathcal{S}_1(v_*)} \nu(v_*, r_*) \frac{3r_*^2 (r_* - R_*)}{R_*^3} \delta_{V_*}(v) \delta_{R_*}(r) f(v_*, r_*) \frac{dn}{2\pi} dr_* dv_*,$$

Étude mathématique d'un couplage fluide-cinétique

On considère le système suivant (spray fin)

$$\begin{array}{l} \text{Euler isentropique} \\ \text{Vlasov} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u + P(\rho)I) = \int f(\rho v - \rho u) dv, \\ \partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot (f(\rho u - \rho v)) = 0, \end{array} \right.$$

où $P(\rho) = \rho^\gamma$ et $\gamma > 1$.

Avec pour condition initiale

$$\begin{array}{ll} \forall x \in \mathbb{R}^N, & \rho(0, x) = \rho_0(x), \\ \forall x \in \mathbb{R}^N, & u(0, x) = u_0(x), \\ \forall (x, v) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N, & f(0, x, v) = f_0(x, v). \end{array}$$

État de l'art sur les aspects mathématiques du couplage fluide-cinétique

- Domelevo-Roquejoffre^a : **Vlasov - Burgers avec viscosité**
∃! solution globale régulière, étude des ondes planes.
- Domelevo^b : **Vlasov (sprays polydispersés) - Burgers avec viscosité** ∃! solution globale avec données initiales moins régulières, comportement en temps grand.
- Hamdache^c : **Vlasov - Stokes**
∃! solution globale régulière, comportement en temps grand.
- Goudon^d : **Vlasov - Burgers avec viscosité**
∃! solution globale régulière, limite hydrodynamique.

^a Existence and stability of travelling waves solutions..., Comm. Part. Diff. Eq.(1999)

^b Long time behaviour for a kinetic modelling..., preprint (2001)

^c Global existence and large time behaviour..., Japan J. Indust. Appl. Math. (1998)

^d Asymptotic problems for a kinetic model of two-phase flow, Proc. Roy. Soc. Edinburgh, (2001)

Le système d'Euler isentropique

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho u) &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla_x(P(\rho)) &= 0.\end{aligned}$$

C'est un système

- de lois de conservation

- hyperbolique si $U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \end{pmatrix} \in G =]0, +\infty[\times \mathbb{R}^N$

Résultat d'existence en temps petit d'une solution régulière au système d'Euler isentropique (cf [Majda^a](#), [Serre^b](#)).

^aCompressible fluid flows and systems of conservation laws in several space variables, Springer-Verlag

^bSystèmes de lois de conservation I, Diderot Editeur

L'équation de Vlasov

$$\partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot ((\rho u - \rho v) f) = 0$$

Méthode des caractéristiques

$$f(t, x, v) = f_0(X(0; x, v, t), V(0; x, v, t)) e^{\int_0^t N \rho(X(\tau; x, v, t), \tau) d\tau},$$

avec

$$\frac{dX}{dt} = V,$$

$$\frac{dV}{dt} = (\rho u)(X(t; x, v, s), t) - \rho(X(t; x, v, s), t) V(t; x, v, s),$$

et $X(s; x, v, s) = x$, $V(s; x, v, s) = v$.

⇒ Contrôle du support en x et v , contrôle des normes L^∞ , L^2

Théorème d'existence en temps petit

Sous les **hypothèses** suivantes

- $\rho_0 - 1 \in H^s(\mathbb{R}^N)$, $u_0 \in H^s(\mathbb{R}^N)$, où $s > N/2 + 1$,
- $(\rho_0, \rho_0 u_0)$ est à valeurs dans G_1 un ouvert relativement compact de $G =]0, +\infty[\times \mathbb{R}^N$ (i.e. $\rho_0 \geq cste > 0$),
- $f_0 \in \mathcal{C}_0^1(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N) \cap H^s(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N)$, $f_0 \geq 0$,

Théorème : $\exists T > 0$ et $\exists !(\rho, \rho u, f)$ au système **Vlasov-Euler isentropique** avec donnée initiale $(\rho_0, \rho_0 u_0, f_0)$ telle que $(\rho, \rho u) \in \mathcal{C}^1([0, T] \times \mathbb{R}^N)$ et $f \in \mathcal{C}_0^1([0, T] \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N)$, $f \geq 0$.

Simulations numériques

- Code homogène
 - $\partial_t f = Q_{coll}(f)$: comparaison avec une solution analytique
 - $\partial_t f = Q_{coll/coal}(f) + Q_{frag}(f)$: étude des trois phénomènes
 - $\partial_t f + \partial_r(\chi f) = Q_{Reitz}(f)$: étude de la distribution en rayon
- Code industriel CEA : mise en place des collisions
 - code résolvant les équations fluides, le transport (en x et v) des gouttelettes et l'interaction via des termes de couplage (force de traînée, force de masse ajoutée,...)
 - ajout d'un module de collision

Modèle de spray utilisé dans le code CEA

Spray épais (ici $f \equiv f(t, x, v, r, T)$)

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\alpha \rho) + \nabla_x \cdot (\alpha \rho u) = 0, \\ \partial_t(\alpha \rho u) + \nabla_x \cdot (\alpha \rho u \otimes u) + \nabla_x p = F^s, \\ \partial_t(\alpha \rho I) + \nabla_x \cdot (\alpha \rho u I) + p (\partial_t \alpha + \nabla_x \cdot (\alpha u)) = \dot{Q}^s, \\ \partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (F f) + \partial_T(\mathcal{T} f) = Q(f), \end{array} \right.$$

- $p = p(\rho, I),$

- $\alpha = 1 - \int \frac{4}{3} \pi r^3 f \, dv \, dT \, dr,$

- $\left\{ \begin{array}{l} F^s = \int \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \nabla_x p + D(v - u) \right) f \, dv \, dT \, dr, \\ \dot{Q}^s = \int (D(v - u)^2 - mc_l \mathcal{T}) f \, dv \, dT \, dr. \end{array} \right.$

Noyau de collision

$$Q(f) = \int_{v^*, r^*, T^*} \cdots \int \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \left\{ f(t, x, v', r, T) f(t, x, v^{*'}, r^*, T^*) - f(t, x, v, r, T) f(t, x, v^*, r^*, T^*) \right\} B \, dv^* dr^* dT^* d\theta d\phi.$$

- Section efficace $B(\theta, |v - v^*|, r, r^*) = \pi |v - v^*| (r + r^*)^2 \frac{\sin \theta}{4\pi}$.

- Vitesses post-collisionnelles

$$\begin{cases} v' = \frac{r^3 v + r^{*3} v^*}{r^3 + r^{*3}} + \frac{r^{*3}}{r^3 + r^{*3}} |v - v^*| \sigma, \\ v^{*'} = \frac{r^3 v + r^{*3} v^*}{r^3 + r^{*3}} - \frac{r^3}{r^3 + r^{*3}} |v - v^*| \sigma. \end{cases}$$

($\sigma \in S^2$ paramétré par θ, ϕ)

Méthode numérique

- **Gaz** : Volumes finis (ordre 2)

ρ, u, I donnés sur la grille Eulérienne

- ρ_i, I_i au centre des mailles

- u_i au sommet des mailles

- **Phase dispersée** : Méthode particulaire

$f \approx$ sommes de masses de Dirac en x, v, r, T .

$$f = \sum_{p=1}^N \omega_p \delta_{x_p, \mathbf{v}_p, r_p, T_p}$$

- **Splitting** en temps : 4 étapes

- étape Lagrangienne pour le gaz

- étape de projection pour le gaz

- transport des gouttelettes (Vlasov)

- collisions

Quatrième étape : $\partial_t f = Q(f)$

On raisonne dans chaque maille C_i comme si f y était constante / x , i.e.

$$f(x, v, r, T) = \sum_{p=1}^{N(i)} \frac{\omega_p}{|C_i|} \delta_{\mathbf{v}_p, r_p, T_p} 1_{C_i}(x)$$

$\frac{\omega_p}{|C_i|}$: poids numérique de la particule p .

- 2 méthodes numériques
 - poids constant (i.e. $\frac{\omega_p}{|C_i|} = \omega, \forall p$)
⇒ Méthode de type Bird
 - poids non constant
⇒ Méthode de type Nanbu

Comparaison des méthodes

● Méthode de type Bird

- conservation à chaque étape de l'impulsion et de l'énergie
- précision de la méthode
- méthode vérifiée grâce au code homogène
- poids numérique constant non réaliste

● Méthode de type Nanbu

- pas de conservation exacte des quantités physiques mais conservation en moyenne
- méthode un peu moins précise
- initialisation de cas physiques réalistes
 - ⇒ poids numériques non constant
 - ⇒ méthode choisie dans le code industriel

Collisions simulées dans le code CEA

Sur le même cas test

- Sans collision
- Avec collision, méthode de type Bird
- Avec collision, méthode de type Nanbu



⇒ Peu de différence entre les méthodes Bird et Nanbu