

## Contribution à la modélisation de la pulvérisation d'un liquide phytosanitaire en vue de réduire les pollutions

Magali Simone Marie de Luca

#### ▶ To cite this version:

Magali Simone Marie de Luca. Contribution à la modélisation de la pulvérisation d'un liquide phytosanitaire en vue de réduire les pollutions. Mécanique [physics.med-ph]. Université de la Méditerranée - Aix-Marseille II, 2007. Français. NNT: . tel-00195424

### HAL Id: tel-00195424 https://theses.hal.science/tel-00195424

Submitted on 10 Dec 2007  $\,$ 

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés. Université Aix-Marseille II Ecole Doctorale : Physique, Modélisation et Sciences pour l'Ingénieur

### Thèse

présentée pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université de la Méditerranée, Aix-Marseille II

Spécialité : Mécanique des Fluides

par Magali DE LUCA

# Contribution à la modélisation de la pulvérisation d'un liquide phytosanitaire en vue de réduire les pollutions

Soutenue publiquement le 6 Décembre 2007 devant la commission d'examen composée de

Directeur de thèse :	BORGHI R. Professeur des Universités Marseille
Rapporteurs :	BERLEMONT A. Directeur de Recherche au CORIA Rouen LANCE M. Professeur à l'Université Claude Bernard Lyon 1, Directeur du LMFA
Examinateurs :	ANSELMET F. Professeur à l'Ecole Centrale Marseille CARTELLIER A. Directeur de Recherche au LEGI Grenoble CHAMPION M. Directeur de Recherche au LCD Poitiers Futuroscope
Invité :	VALLET A. Chargée de Recherche au CEMAGREF Montpellier

Unité Mixte de Recherche Information et Technologies pour les Agro-procédés CEMAGREF 361 rue J.F Breton - B.P. 5095 - 34196 Montpellier

Mis en page avec la classe Phdlasl

#### Remerciements

La préparation de ce doctorat s'est déroulée aux laboratoires du Cemagref de Montpellier au sein de l'UMR ITAP, et de l'EGIM à Marseille où j'ai vécu de belles années riches en rencontres scientifiques et humaines. Je tiens à remercier Madame Véronique Bellon-Morel, directrice du laboratoire qui m'a permis de terminer ma thèse dans les meilleures conditions. Je me dois aussi de remercier les institutions qui ont financé ce travail : l'ADEME et le CEMAGREF. Merci aussi à l'INPG de Grenoble où se sont déroulées les expérimentations en vue de la validation du modèle.

En premier lieu, je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Madame Ariane Vallet qui m'a offert la chance de travailler dans son équipe. Sa qualité d'encadrement, son écoute, sa disponibilité, son dynamisme, sa patience et sa bonne humeur ont fait de cette thèse une belle Aventure. Ses compétences scientifiques, sa rigueur et son esprit de synthèse m'ont beaucoup apporté. Merci aussi pour la liberté qu'elle m'a laissée dans mes travaux.

Réellement merci à Monsieur Emmanuel Fiani qui à l'ADEME a suivi l'évolution de ce travail et qui à ce sujet s'est déplacé à plusieurs reprises. Je le remercie d'avoir accepté d'être membre du jury.

Il me serait impossible également de ne pas remercier Monsieur Roland Borghi qui a accepté de diriger ma thèse et qui m'a accueillie pendant six mois dans son bureau. Je ne saurais oublier son engagement remarquable, sa grande disponibilité ainsi que sa disposition naturelle à m'apporter soutien et conseils avisés malgré sa charge de travail. Tout au long de ma formation en DEA et de ma thèse, j'ai pu apprécier ses qualités de professeur exceptionnelles, sa gentillesse et sa simplicité. Il a contribué à développer mon goût initial pour la recherche.

Je souhaite remercier Messieurs Alain Berlemont et Michel Lance qui ont accepté la lourde tâche de rapporteurs.

Mes vifs remerciements vont également à Messieurs Fabien Anselmet, Alain Cartellier, Michel Champion pour l'honneur qu'ils me font en acceptant de juger ce travail.

Je témoigne toute ma reconnaissance à Messieurs Olivier Simonin, François-Xavier Demoulin qui m'ont guidée dans mes recherches. Merci aussi à Bernard Bonicelli, Carole Sinfort et Bijan Mohammadi pour leurs conseils et leur aide. Je tiens aussi à exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur André Tchiftchibachian avec qui j'ai eu le plaisir d'effectuer mon stage de DEA au CEMAGREF d'Aix. Ses encouragements permanents m'ont beaucoup touchée. Je remercie également Messieurs Jean-Paul Giovanangeli, Christian Kharif et les membres de leur équipe qui m'ont accueillie pour un stage de six mois. Je garde de cette période un excellent souvenir. J'ai à ce propos une pensée émue pour Monsieur Tanos Elfouhaily qui a été un tuteur remarquable et qui nous a quittés, j'ai pour sa femme et ses enfants une pensée affectueuse.

Je remercie chaleureusement les enseignants et personnels administratifs d'UNIMECA à Marseille, et en particulier, Messieurs Patrick Vigliano, Philippe Bournot et Dominique Morvan qui m'ont permis de poursuivre mes études et m'ont incitée à effectuer un doctorat.

Cette thèse, dédiée à la modélisation numérique, n'aurait pu se dérouler correctement sans l'aide précieuse et le travail efficace des informaticiens. Je tiens donc à remercier les services informatiques de l'EGIM, Olivier Page et ses collègues marseillais et du CE-MAGREF, un grand merci à Jean-Luc Lablée que j'ai souvent sollicité et qui a toujours répondu avec bonne humeur. Merci aussi à Gilles Bonnet, responsable de la ferme de calcul du CEMAGREF et à l'équipe du Support Fluent que j'ai contactés à maintes reprises et qui m'ont permis de progresser dans la compréhension du code. Merci également aux services administratifs de Montpellier et Marseille : Mesdames Martine Rombaut, Michèle Egea, Aline Merlot, Nathalie Briffa, Françoise Tavera et Super Domi qui se reconnaîtra!

Je veux également remercier les personnes qui, par leur collaboration, ont contribué au bon déroulement et à l'aboutissement de ces travaux de recherche : Philippe Roux avec son humour détonant qui avec ses compétences concernant le logiciel de C.A.O. CATIA a élaboré la géométrie du domaine de calcul, Jean-Michel Fatou qui avec son talent et sa créativité m'a aidée dans la réalisation de mes posters, Serge Guillaume et Jean-Michel Roger pour leur aide dans Latex, Olivier Naud pour sa méthodologie dans la construction des écrits scientifiques et ses connaissances en Anglais, merci aussi à ce propos à Laetitia Vincent, Cyril Tinet pour la réalisation des expérimentations et tous les techniciens.

Je salue chaleureusement tout le personnel du CEMAGREF avec une mention particulière pour Madame Bernadette Ruelle ma voisine de bureau et mon taxi du soir. Comment oublier les thésards, les stagiaires et postdocs que j'ai côtoyés au sein de l'équipe et avec qui j'ai partagé de bonnes parties de rigolade; notre grande table du midi et nos mémorables discussions me manqueront. A toutes et à tous, je souhaite bonne route !

Je ne pourrais achever ses remerciements sans remercier le personnel de l'Institut Paoli-Calmettes à Marseille et en particulier, le service du professeur Reda Bouabdallah à qui je dois tant, pour ne pas dire tout ... En les rencontrant, j'ai découvert des personnes extraordinaires qui savent allier compétence, humilité, humanité et générosité.

Enfin, comment ne pas remercier ma famille qui depuis toujours m'a entourée de son amour. Une place à part revient à mes parents qui m'ont tout donné, soutenu, fait confiance et bien plus encore ainsi qu'à ma sœur qui a toujours su me redonner le sourire et qui est sans aucun doute un coach hors pair ! Merci aussi à mes cousines, à tati Henriette, tati Claudette qui me supportent depuis longtemps ainsi qu'à Françoise et Antoinette qui m'ont aidée pendant mes jeunes années.

Tout simplement merci à la Vie ...

J'adresse ces quelques mots empreints de maladresses mais remplis de tendresse à tous ceux que j'aime et à toutes les personnes qui m'ont permis de vivre cette merveilleuse Aventure ...

Merci à vous d'être aujourd'hui Tous réunis Pour partager ensemble cette merveilleuse journée Grâce à vous je sais qu'il faut toujours croire en ses rêves, Car il est des jours où j'avais froid Où au plus profond de moi j'avais peur, Mais de votre chaleur Vous avez inondé mon cœur Et votre présence M'a permis De garder confiance M'a délivrée de mes ennuis, Fait sortir de ma nuit En effet, s'effacent les problèmes, Quand on est entouré de ceux qu'on aime, Aujourd'hui, je n'ai rien d'autre à dire Si ce n'est un immense merci C'est l'hiver Et pourtant au fond de mon cœur J'ai si chaud Et dans mes yeux brillent les étoiles Comme ces milliers d'enfants Qui attendent minuit Remplis de cette joie infinie, Consciente de l'immense cadeau Que me fait la vie D'être en ce jour si beau En votre compagnie, Je commence une nouvelle vie! Magali

« La véritable science enseigne, par-dessus tout, à douter et à être ignorant. » Miguel de Unamuno

A mes parents et à ma sœur Cécile qui ont donné à chaque jour de ma vie un goût de paradis et que j'aime du plus profond de mon cœur ...

A mes grands-parents, à ma petite Lucie et à Nico que j'ai eu la chance de croiser sur mon chemin et qui se sont envolés trop tôt . . . Par leur courage et leur joie de vivre, ils avaient inondé de Soleil mes lendemains.

Et à tous ceux pour qui la Vie est un combat ...



#### **Terra Turbulenta**

D'après P. Chassaing Turbulence en mécanique des fluides (Page 573)

#### Résumé

7

La viticulture est une activité très consommatrice de pesticides (20% de la consommation totale française). Par conséquent, il semble capital d'optimiser les procédés de pulvérisation en milieu agricole afin de réduire les quantités de produits appliquées. Les traitements sont la plupart du temps pulvérisés sous forme d'une bouillie liquide composée d'eau et de matières actives, auxquelles sont ajoutées d'autres substances comme les surfactants et les adjuvants afin de faciliter leur emploi et d'améliorer leur efficacité. Des études récentes ont souligné que les tailles et vitesses de gouttes produites en sortie de buses ont un fort impact sur l'efficacité des traitements. En effet, suivant ces caractéristiques, les gouttes sont plus ou moins soumises aux phénomènes d'évaporation, de dérive ou de ruissellement. L'objectif de la présente étude est donc de modéliser l'atomisation des jets de pesticides afin d'obtenir la dispersion liquide, et les caractéristiques du jet. Ces données pourront servir de conditions initiales aux modèles de transport et de dépôt. Pour cela, un modèle Eulérien développé dans le secteur automobile est utilisé. Il suppose l'écoulement turbulent d'un « pseudo-fluide » avec une masse volumique comprise entre celle d'un liquide et celle d'un gaz. La dispersion du liquide dans la phase gazeuse est calculée grâce à l'équation de la fraction massique liquide movenne. La taille movenne des fragments liquides produits est quant à elle déterminée au moyen d'une équation pour la surface moyenne de l'interface liquide-gaz par unité de volume, dans laquelle sont pris en compte les phénomènes physiques responsables de la production et destruction de surface. La modélisation de la turbulence est assurée par le modèle aux tensions de Reynolds. Les équations du modèle ont été implémentées dans le code commercial CFD, Fluent et appliquées au cas d'une buse à turbulence agricole. Des calculs numériques tridimensionnels de l'écoulement interne et externe de la buse ont été réalisés jusqu'à une distance d'environ 1 cm de la sortie. Les résultats numériques délivrés par le modèle semblent montrer un bon accord avec les photographies des jets obtenues par ombroscopie. Ils indiquent la formation d'une nappe liquide creuse en sortie de buse et la présence de zones de recirculation au sein de l'écoulement, soulignant l'existence d'un coeur d'air. Pour ce qui est des tailles de gouttes, les résultats mettent en évidence la présence d'une couronne de gouttes relativement grosses et, au milieu, de gouttes plus fines, conformément aux expérimentations. Ils soulignent également le fait que la cassure du spray se produit très près de la sortie de la buse.

**Mots clés** : Modélisation de l'atomisation, fragmentation, code CFD, taille de gouttes, nappe liquide conique creuse, surface liquide moyenne par unité de volume, maillage, pesticides, réduction de la pollution, modèle aux tensions de Reynolds, buse à turbulence.

#### Abstract

Viticulture is a very pesticides intensive crop (20%) of overall French consumption). Therefore, optimizing spraying process is the key to reduce the amount of pesticides applied. Spray application most often consists in the spraying of a liquid mush composed of water, adjuvants and active ingredients. Recent research has shown that droplet size and velocity have a strong influence on the spraying efficiency. The purpose of the present work is to model the atomization process in order to characterize the flow in terms of droplet size and velocity distributions as well as liquid dispersion. These data would be used later as inlet conditions for transport or deposit models. For the numerical prediction of these quantities, an Eulerian model based on studies developed in the automotive industry was used. It assumed atomization as turbulent mixing in a flow with variable density. Dispersion of the liquid in the gas phase was computed by an equation for the mean liquid mass fraction. We calculated the mean size of liquid fragments through the modelling of the mean surface area of the liquid-gas interface per unit of volume. The equation related to the last variable was composed of various terms that took into account the physical phenomena responsible for interface stretching and collapse. Turbulence was modelled using a Reynolds Stress Model. These equations were implemented into the commercial CFD code, Fluent and were applied to an agricultural swirl nozzle. Numerical three-dimensional calculations of the flow inside the nozzle and in the dense spray region were conducted up to 1 cm of the exit. Results concerning the liquid dispersion are in good agreement with experimental shadowgraph images; they show the same morphological behaviour of the jet : we obtain a hollow conical liquid sheet and the presence of a recirculation area that indicates the formation of an air core is underlined. Moreover, the break-up length and drop sizes calculated are also consistent with experimental results. They show that spray break-up occurs very close to the nozzle exit.

**Keywords** : Atomization modeling, break-up, CFD code, droplet size, hollow cone liquid sheet, mean surface area of the liquid-gas interface per unit of volume, mesh, pesticides, pollution reduction, Reynolds Stress Model, swirl nozzle.

## Nomenclature

La partie A et en particulier le chapitre II qui dresse un inventaire des modèles d'atomisation disponibles dans la littérature font référence à des notations spécifiques. C'est pourquoi il est préférable de leur dédier une section distincte au sein de la nomenclature.

Partie A

Alphabet latin

- $A_1$  constante dans l'expression de l'angle du spray pour le modèle Wave (-)
- $B_0$  constante dans l'expression du rayon des gouttes filles pour le modèle Wave (-)

 $B_1$  constante du temps de rupture dans le modèle Wave (-)

- b coefficient d'amortissement  $(kg \cdot s^{-1})$
- $C_b$  coefficient empirique du modèle T.A.B. (-)
- $C_{bb}$  constante du temps de rupture du « bag breakup » (-)
- $C_d$  coefficient de perte de charge (-)
- $C_F$  coefficient empirique du modèle T.A.B. (-)
- $C_k$  coefficient empirique du modèle T.A.B. (-)
- $C_{sb}$  constante du temps de rupture du « stripping breakup » (-)

 $C_v$  constante dans l'expression de la vitesse normale des gouttes filles pour le modèle T.A.B. (-)

 $C_{\mu}$  constante du modèle  $k - \epsilon$  intervenant dans la viscosité turbulente  $\mu_t$  (-)

 $C_{\theta}$  constante dans l'expression de l'angle du spray pour le modèle de Reitz-Diwakar (-)

 $D_{0.5}$  Diamètre Médian de Masse (m)

 $D_{1,0}$  diamètre moyen en longueur (m)

 $D_{2,0}$  diamètre moyen en surface (m)

 $D_{3,0}$  diamètre moyen en volume (m)

 $D_{3,1}$  diamètre moyen volume-longueur (m)

 $D_{3,2}$  Diamètre Moyen de Sauter (m)

 $D_{inj}$  diamètre de l'injecteur (m)

 $d_0$  longueur caractéristique intervenant dans les nombres de Weber et d'Ohnesorge pour le modèle de Pilch et Erdman (m)

dN nombre de gouttes contenues dans une tranche dD (-)

dQ volume contenu dans une tranche dD ( $m^3$ )

 $d_{st}$  diamètre de stabilité des gouttes après fractionnement (m)

F force externe (N)

 $f_N(D)$  fonction de distribution de taille définie en nombre

 $f_Q(D)$  fonction de distribution de taille définie en volume

K constante dans l'expression du rayon des gouttes filles pour le modèle T.A.B. et le modèle de Huh et Gosman (-)

k constante de raideur du ressort  $(N \cdot m^{-1})$ 

 $k_{inj}$  énergie cinétique turbulente dans le nez de l'injecteur  $(m^2 \cdot s^{-2})$ 

 $L_A$  longueur caractéristique de l'atomisation (m)

 $L_{co}$  longueur de coeur liquide (m)

 $L_{inj}$  longueur de l'injecteur (m)

 $L_{su}$  longueur de surface intacte (m)

 $L_t$  échelle intégrale de la turbulence (m)

 $L_w = 4 L_t$  longueur caractéristique (m)

m masse (kg)

Oh nombre d'Ohnesorge (-)

P pression  $(Pa; 10^5 Pa = 1bar)$ 

Re nombre de Reynolds (-)

r rayon d'une goutte produite par fractionnement (m)

 $r_0$  rayon de la goutte mère (m)

 $r_1$  rayon des gouttes filles stables après fractionnement (m)

 $r_{32}$  Rayon Moyen de Sauter des gouttes filles (m)

 $r_{stable}$  rayon stable de gouttes (m)

- Ta nombre de Taylor (-)
- $T_{bu}$  temps de rupture adimensionné du modèle de Pilch et Erdman (-)

t temps (s)

 $t_{bb}$  temps de rupture du « bag breakup » (s)

 $t_{b,bag}$  temps de rupture du « bag breakup » dans le modèle T.A.B. (s)

 $t_{b,stripping}$  temps de rupture du « stripping breakup » dans le modèle T.A.B. (s)

 $t_{pe}$  temps de rupture dans le modèle de Pilch et Erdman (s)

- $t_{sb}$  temps de rupture du « stripping breakup » (s)
- $t_w$  temps de rupture dans le modèle Wave (s)
- U vitesse relative liquide/gaz  $(m \cdot s^{-1})$

 $U_r$  vitesse relative goutte/gaz due au fractionnement  $(m \cdot s^{-1})$ 

u vitesse moyenne du liquide en sortie d'injecteur  $(m \cdot s^{-1})$ 

- $V_0$  composante de vitesse radiale des gouttes filles dans le modèle Wave  $(m \cdot s^{-1})$
- $V_{\perp}$  vitesse normale des gouttes filles  $(m \cdot s^{-1})$
- We nombre de Weber (-)
- x déplacement de l'équateur de la gouttelette dans le modèle T.A.B. (m)

#### Alphabet grec

 $\epsilon_{inj}$  taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente dans le nez de l'injecteur  $(m^2 \cdot s^{-3})$ 

- $\theta$  angle du spray (°)
- $\Lambda$  longueur d'onde la plus instable (analyse de stabilité linéaire) (m)
- $\mu$  coefficient de viscosité dynamique moléculaire ( $Pa \cdot s$  ou Pl)
- $\rho$  masse volumique  $(kg \cdot m^{-3})$
- $\sigma$  coefficient de tension de surface  $(N \cdot m^{-1})$
- $\tau_A$  temps caractéristique de l'atomisation (s)
- $\tau_t$  échelle de temps de la turbulence (s)
- $\tau_w$  échelle de temps d'accroissement d'ondes (s)
- v coefficient de viscosité cinématique  $(m^2 \cdot s^{-1})$

 $\Omega$  taux de croissance de l'onde la plus instable (analyse de stabilité linéaire)  $(s^{-1})$ 

Indices

- c critique
- g gaz
- l liquide
- st stable
- t turbulent

La nomenclature ci-dessous se rapporte aux parties suivants.

#### Partie B et C

Alphabet latin

- A terme de production macroscopique de  $\overline{\Sigma}$   $(s^{-1})$
- a terme de production microscopique de  $\overline{\Sigma}$   $(s^{-1})$
- $a_1$  constante du terme de destruction de  $\overline{\rho} \widetilde{u''_i Y''}$  (-)
- $a_{coll}$  terme de production microscopique de  $\overline{\Sigma}$  lié aux collisions  $(s^{-1})$
- $a_{turb}$  terme de production microscopique de  $\overline{\Sigma}$  lié à la turbulence  $(s^{-1})$
- C constante du rayon moyen d'équilibre (-)
- $C_1$  constante de la composante lente  $\Phi_{ij,1}$  du tenseur de redistribution (-)
- $C'_1$  constante de la composante  $\Phi_{ij,w}$  du tenseur de redistribution liée aux parois
- $C_2$  constante de la composante rapide  $\Phi_{ij,2}$  du tenseur de redistribution (-)
- $C'_2$  constante de la composante du tenseur de redistribution liée aux parois  $\Phi_{ij,w}$
- $C_{ij}$  élément (i,j) du terme de corrélation vitesse-gradient de pression

 $C_l = C_{\mu}^{3/4} / \kappa$  constante de la composante  $\Phi_{ij,w}$  du tenseur de redistribution liée aux parois

 $C'_s$  constante du terme de diffusion (modèle de Daly et Harlow) de l'équation du tenseur de Reynolds (-)

 $C_{yr}$  constante intervenant dans la modélisation du terme  $\overline{p' \frac{\partial Y''}{\partial x_i}}$  proposée par Launder et Lumley (-)

 $C_y$  constante intervenant dans la nouvelle modélisation du flux turbulent  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i Y''}$  proposée par Demoulin (-)

 $C_{\epsilon 1}$  constante de l'équation du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente (-)  $C_{\epsilon 2}$  constante de l'équation du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente (-)  $C_{\mu}$  constante intervenant dans la viscosité turbulente  $\mu_t$  (pour les modèles à deux équations et plus) (-)

 $C^1_{\mu}$  constante intervenant dans la viscosité turbulente pour les modèles à une équation (-)

 $D_{3,2}$  Diamètre Moyen de Sauter (m)

 $\overline{\rho} D_{ij}$  élément (i,j) du terme de diffusion de  $\overline{\rho} \widetilde{u''_i u''_i}$ 

 $D_{ij}^p$  élément (i,j) du terme de diffusion par la pression de  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i \, u''_j}$ 

 $D_{ij}^t$  élément (i,j) du terme de diffusion turbulente de  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i \, u''_j}$ 

 $D_{ij}^{\mu}$  élément (i,j) du terme de diffusion par le mouvement moléculaire de  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i \, u''_j}$ 

d distance normale à la paroi (m)

 $F_{cap}$  force capillaire

f variable

g variable

h variable

 $KE_{initial}$  énergie cinétique avant la collision (J)

k énergie cinétique turbulente  $(m^2 \cdot s^{-2})$ 

l échelle de longueur (m)

 $l_{coll}$  longueur caractéristique de collision (m)

 $l_m$  longueur de mélange (m)

 $l_t$  échelle intégrale de turbulence (m)

 $l^*$  échelle de longueur caractéristique de la turbulence (m)

m masse (kg)

n nombre de gouttes par unité de volume  $(m^{-3})$ 

Oh nombre d'Ohnesorge (-)

 $\overline{\rho} P_{ij}$  élément (i,j) du terme de production de  $\overline{\rho} \widetilde{u''_i u''_i}$ 

 $P_k = \frac{1}{2} P_{kk}$  terme de production d'énergie cinétique turbulente

p pression  $(Pa; 10^5 Pa = 1bar)$ 

Re nombre de Reynolds (-)

r rayon des gouttes (m)

 $r_{32}$  Rayon Moyen de Sauter (m)

 $r_{eq}$  rayon moyen d'équilibre des gouttes (m)

 $r_{initial}$  rayon des gouttes avant collision (m)

 $r_{final}$  rayon des gouttes générées par fractionnement d'une goutte après collision (m)

 $SE_{initial}$  énergie de surface avant la collision (J)

 $SE_{final}$  énergie de surface après la collision (J)

Sc nombre de Schmidt (-)

t temps (s)

 $u_i \quad i^{me}$  composante de la vitesse  $(m \cdot s^{-1})$ 

 $u^*$  échelle de vitesse caractéristique de la turbulence

 $V_a$  vitesse intervenant dans le terme de destruction de  $\overline{\Sigma}$   $(m \cdot s^{-1})$ 

 $v_r$  vitesse associée aux petites échelles  $(m \cdot s^{-1})$ 

We nombre de Weber (-)

 $x_i \quad i^{me}$  composante de l'espace (m)

 $n_k$  composante selon  $x_k$  de la normale unitaire à la paroi

Y fraction massique du liquide (-)

Alphabet grec

 $\alpha_0$  constante positive dans l'expression initiale du terme de production macroscopique de  $\overline{\Sigma}$  (-)

 $\alpha'_0$  constante positive dans la nouvelle expression du terme de production macroscopique de  $\overline{\Sigma}$  (-)

 $\alpha_1$  constante du terme de production microscopique de  $\overline{\Sigma}$  lié à la turbulence (-)

 $\alpha_{02}, \alpha_2$  constantes du terme de production microscopique de  $\overline{\Sigma}$  lié aux collisions (-)  $\Gamma_{\Sigma}$  terme source de l'équation de la surface liquide moyenne volumique  $(m^{-1} \cdot s^{-1})$  $\gamma$  constante du terme de destruction de  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i Y''}$  (-)

- $\gamma'$  constante du terme de destruction de  $\overline{\rho} \widetilde{u''_i Y''}$  (-)
- $\delta_{ij}$  symbole de Kronecker
- $\epsilon$  taux de dissipation de k  $(m^2 \cdot s^{-3})$
- $\kappa$  constante de Von Karman (-)
- $\mu$  coefficient de viscosité dynamique moléculaire  $(Pa \cdot s)$
- $\mu_t, \, \nu_t = \tfrac{\mu_t}{\bar{\rho}} \qquad \text{coefficients de viscosité turbulente } (kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1} \, ; \, m^2 \cdot s^{-1})$
- $\rho$  masse volumique variant entre celle du liquide et celle du gaz  $(kg \cdot m^{-3})$
- $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i \, u''_j} = \overline{\rho} \, \widetilde{R_{ij}} \qquad \text{élément (i,j) du tenseur de Reynolds} \qquad (kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2})$
- $\Sigma$  surface de liquide par unité de volume total  $(m^{-1})$

 $\overline{\rho}\Sigma_{ij}$  élément (i,j) du terme de dissipation sous l'effet de la viscosité moléculaire de  $\overline{\rho} \widetilde{u''_i u''_j}$  $\sigma$  coefficient de tension de surface  $(N \cdot m^{-1})$ 

 $\sigma_k$  constante du terme de diffusion (modèle de Lien *et al*) de l'équation du tenseur de Reynolds (-)

 $\sigma_{\epsilon}$  constante du terme de diffusion de l'équation du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente (-)

- au fraction volumique du liquide (-)
- $\tau_{coll}$  temps caractéristique de collision (s)

 $\tau_{ij}$  élément (i,j) du tenseur des contraintes visqueuses

- $\tau_t = \frac{k}{\tilde{\epsilon}}$  temps caractéristique de la turbulence (s)
- $\tau_K$  temps de Kolmogorov (s)
- $\Phi_{ij}$  élément (i,j) du terme de redistribution de  $\overline{\rho} u_i'' u_i''$
- $\Phi_{ij,1}$  composante lente du tenseur de redistribution  $\Phi_{ij}$
- $\Phi_{ij,2}$  composante rapide du tenseur de redistribution  $\Phi_{ij}$
- $\Phi_{ij,w}$  composante du tenseur de redistribution  $\Phi_{ij}$  liée aux parois

#### Indices

- a atomisation
- c critique
- g gaz
- eq équilibre

- *l* liquide
- t turbulent

Symboles et opérateurs

- $\partial$  opérateur de dérivée partielle
- $\partial t$  opérateur de dérivée partielle par rapport au temps
- $\partial x_i$  opérateur de dérivée partielle par rapport à l'espace
- moyenne de Reynolds
- ~ moyenne de Favre
- ' fluctuation turbulente au sens de Reynolds
- " fluctuation turbulente au sens de Favre

#### Abréviations

ADEME Agence De l'Environnement et Maîtrise de l'Energie

CEMAGREF Institut de recherche pour l'ingénierie de l'agriculture et de l'environnement

- CNRS Centre National de Recherche Scientifique
- DNS Direct Numerical Simulation
- IMFT Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse
- INRA Institut National de la Recherche Agronomique
- MMD Mass Median Diameter
- SMD Sauter Mean Diameter

## Table des matières

Nom	nenclature	9
Ir	ntroduction	23
A	Définition de la problématique : contexte général	

et	sc:	ienti	fique		25
Ι	Contexte et enjeux				27
	I.1	Problé	ematique .		27
		I.1.1	Consom	nation des pesticides	27
		I.1.2	Caractér	isation des pesticides	29
		I.1.3	Impact e	environnemental des pesticides	31
			I.1.3.1	Un constat alarmant : une contamination généralisée	31
			I.1.3.2	Dispersion et devenir des pesticides dans l'environnement .	33
			I.1.3.3	Deux facteurs prépondérants dans la dispersion des pesti-	
				cides : la taille et la vitesse des gouttes	36
			I.1.3.4	Techniques et matériels de pulvérisation	37
	I.2	2 Objectifs et méthodologie			43
II	Syn	thèse	bibliogra	phique sur l'atomisation des jets	47
II.1 L'atomisation et sa terminologie		nisation et	t sa terminologie	47	
	II.1.1 Grandeurs caractéristiques		rs caractéristiques	48	
		II.1.2	Régimes	de fractionnement des jets ronds	51
		II.1.3	Régimes	de fractionnement des jets coniques creux	54

	II.1.4	Paramètres influençant l'atomisation	55
II.2	Modél	isation de l'atomisation des jets	57
	II.2.1	Modèles Lagrangiens	57
		II.2.1.1 Modèle de Reitz-Diwakar	57
		II.2.1.2 Modèle T.A.B.	59
		II.2.1.3 Modèle Wave	61
		II.2.1.4 Modèle de Huh et Gosman	62
		II.2.1.5 Modèle de Pilch et Erdman	64
		II.2.1.6 Modèle Wave-FIPA	65
		II.2.1.7 Modèle de Patterson-Reitz	66
		II.2.1.8 Modèle D.D.B	66
		II.2.1.9 Modèle de Gavaises-Arcoumanis	67
		II.2.1.10 Modèle C.E.B	69
		II.2.1.11 Conclusion sur les modèles Lagrangiens	71
II.3	Modél	isation des écoulements diphasiques	72
	II.3.1	Introduction	72
	II.3.2	Modèles de mélange	72
		II.3.2.1 Méthodes à suivi d'interface	74
	II.3.3	Modèles à deux fluides	82
	II.3.4	Conclusion	83
BN	Aodé	lisation Eulérienne de l'atomisation	87
III Mo	délisat	ion de la dispersion du liquide	89
III.1	Bases	théoriques	89
III.2	Equat	ions instantanées	90
III.3	Equat	ions du modèle	91
	III.3.1	Opérateurs de moyenne	91
	III.3.2	Equations moyennées	93
		III.3.2.1 Equations de conservation de la masse moyennée :	93
		III.3.2.2 Equations de conservation de la quantité de mouvement	
		moyennée :	93

	III.3.2.	B Equation d'état	94
	III.3.2.	4 Equations de conservation de la fraction massique de li-	
		quide moyennée :	94
III.4 Fe	ermeture du	tenseur de Reynolds $\overline{\rho}  \widetilde{u_i''  u_j''}$ et modélisation de la turbulence	
du	ı mélange .		95
II	I.4.1 Différe	nts niveaux de fermeture	95
	III.4.1.	l Modèles à viscosité turbulente ou modèles du premier ordre	95
	III.4.1.	2 Modèles du second ordre	97
II	I.4.2 Equation	on de transport des tensions de Reynolds	98
	III.4.2.	1 Modélisation du terme de diffusion $\overline{\rho} D_{ij} \ldots \ldots \ldots \ldots 1$	00
	III.4.2.	2 Modélisation du terme de corrélation fluctuation de vitesse-	
		gradient de pression $C_{ij}$	00
	III.4.2.	3 Modélisation du terme de dissipation visqueuse $\overline{\rho} \Sigma_{ij}$ 1	01
	III.4.2.	4 Modélisation du terme de corrélation pression-déformation	
		$\Phi_{ij}$	01
	III.4.2.	5 Modélisation de l'énergie cinétique turbulente $\widetilde{k}$ 1	03
III.5 Fe	ermeture du	flux turbulent des fluctuations de fraction massique $\overline{\rho} \widetilde{u_j''Y''}$ . 1	04
II	I.5.1 Modéli	sation de type premier gradient	04
II	I.5.2 Equation	on de transport pour $\overline{\rho}  \widetilde{u''_j Y''}  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  $	05
IV Modél	isation de l	a taille des fragments liquides 10	09
IV.1 In	troduction .		09
IV.2 Ec	quation de la	surface liquide moyenne volumique	10
IV	V.2.1 Terme	de production de surface $a \overline{\Sigma}$	11
IV	V.2.2 Terme	de production de surface $A \overline{\Sigma}$	12
IV	V.2.3 Terme	de destruction de surface $V_a \overline{\Sigma}^2$	13
IV.3 De	éveloppemen	t de nouvelles expressions	15

## C Comportement du modèle et validation expérimen-

### tale

### 117

V Application du modèle à l'écoulement interne et externe d'une buse	
agricole 12	21
V.1 Description générale de la buse	21
V.2 Discrétisation des équations et mise en œuvre numérique	22
V.3 Géométrie du domaine de calcul et conditions aux limites	23
V.4 Maillage de la géométrie	25
V.5 Calcul parallèle et temps de calcul	26
VI Résultats et discussion 13	31
VI.1 Introduction	31
VI.2 Résultats concernant la dispersion du liquide	32
VI.2.1 Champs et profils des fractions liquides moyennes $\widetilde{Y}$ et $\overline{\tau}$ 13	32
VI.2.2 Champs et profils de la pression et de la vitesse	35
VI.2.3 Profils des quantités turbulentes	39
VI.2.4 Influence de la modélisation du terme de diffusion sur les profils des	
fractions liquides $\ldots \ldots \ldots$	13
VI.3 Résultats concernant la taille des fragments liquides	14
VI.3.1 Comparaison des rayons moyen $r$ et d'équilibre théorique $r_{eq}$ des	
gouttes	15
VI.3.2 Influence relative des contributions $a$ pour $A \neq 0$	46
VI.3.3 Influence relative des contributions $a$ pour $A = 0$	18
VI.3.4 Influence relative des contributions $a$ et $A$	19
VI.3.5 Influence de la nouvelle modélisation de la contribution $A$ 15	50
VI.3.6 Influence de la pression d'injection	52
VI.3.7 Prise en compte des surfactants	53
VI.4 Comportement du modèle avec les modifications de constantes 15	54
VI.4.1 Influence de la constante $\alpha_0$	54
VI.4.2 Influence de la constante $\alpha'_0$	55
VI.4.3 Influence de la constante $C$	56
VI.4.4 Tracé des fonctions de répartition de rayon et de flux	57

VI.5 Validation expérimentale	158
Conclusion	165
Annexes	171
<b>A</b> Utilisation du modèle $(k, \epsilon)$	173
	110
B Acte du congrès EUROMECH 2007	175
Bibliographie	187

## Introduction

Afin de nourrir une population toujours grandissante, les rendements agricoles n'ont dû cesser de croître et ce aux dépens de l'environnement. La « révolution verte », mettant à disposition de l'agriculture les technologies les plus avancées (machinisme agricole, engrais, pesticides, ...) pour répondre à ces exigences, a eu pour conséquence un accroissement spectaculaire de la productivité mais a entraîné de nombreux effets secondaires, un usage excessif de pesticides et un appauvrissement des sols, et n'a fait ainsi qu'accentuer les pollutions environnementales. Les effets néfastes observés ont provoqué une prise de conscience mondiale de la nécessité de développer une agriculture écologiquement viable qui veille à la protection des ressources naturelles de façon durable. Ce concept a engendré l'avènement d'une agriculture dite « de précision » qui s'appuie sur des technologies innovantes visant à maîtriser les rejets de polluants dans la nature. L'épandage de pesticides constitue un exemple d'activité nécessitant un apport technologique certain tant il est polluant. Les préoccupations en matière de risques liés à une forte utilisation des produits phytosanitaires se sont, en effet, amplifiées depuis une vingtaine d'années. Les mesures prises en France jusqu'à présent concernent principalement la santé des opérateurs et la réduction des pollutions ponctuelles en relation avec les mauvaises pratiques. Elles s'appliquent encore peu aux pollutions diffuses et à la consommation élevée de pesticides. La réduction des quantités de produits appliqués est pourtant désormais mise en avant dans les politiques Santé-Environnement, sous l'impulsion des associations de consommateurs et de protection de l'environnement, mais sa mise en œuvre se limite pour l'heure à quelques pays seulement de l'Union Européenne. Dans ce contexte, s'inscrit la présente étude dont l'objectif principal est de parvenir à optimiser les procédés de pulvérisation en milieu agricole. La démarche consiste à modéliser l'atomisation des jets de pesticides afin de pouvoir disposer des tailles et des vitesses de gouttes produites en sortie de buses, ces caractéristiques conditionnant fortement le transport ainsi que le dépôt des produits. Pour cela, il a fallu adapter et implémenter le modèle initialement développé par Vallet et Borghi [102] dans le code de calcul commercial Fluent.

Ce mémoire de thèse s'articule en trois parties :

La première partie est une synthèse bibliographique. Après un premier chapitre de présentation du contexte général, l'objectif du second chapitre est de décrire l'atomisation des jets liquides et de donner un aperçu des différents modèles disponibles dans la littérature pour représenter ce phénomène. On verra que la plupart de ces modèles proviennent des secteurs automobile et aéronautique [53, 55] et sont basés sur la théorie linéaire [51].

La seconde partie pose les bases théoriques du modèle Eulérien retenu dans le cadre de la thèse. Elle se compose des chapitres III et IV qui décrivent respectivement la modélisation de la dispersion du liquide et celle de la taille des fragments liquides. Les spécificités du modèle sont mises en lumière ainsi que son originalité en ce qui concerne le traitement de la turbulence [102, 103]. Bien évidemment, les hypothèses sur lesquelles il repose et ses équations caractéristiques sont exposées et discutées. Des propositions quant à l'écriture de certains termes sont réalisées afin de tendre vers une meilleure prise en compte de la physique de l'écoulement.

Dans la troisième partie, le modèle est appliqué au cas de la pulvérisation agricole avec une buse à turbulence, matériel largement employé dans le contexte de l'agriculture régionale. L'outil numérique utilisé pour réaliser cette étude est précisé et les principales étapes de la modélisation sont résumées dans le chapitre V : choix du domaine de calcul, maillage, temps de calcul, conditions aux limites imposées. Puis, les résultats relatifs à la dispersion du liquide et aux caractéristiques de gouttes sont présentés au chapitre VI et font l'objet de discussions. Ils sont donnés respectivement pour les cas d'un jet d'eau et d'une préparation mettant en jeu des surfactants injectés dans un milieu gazeux au repos (air). Enfin, le modèle est validé par les expérimentations.

Ce manuscrit s'achève avec un chapitre de conclusion qui synthétise les principaux résultats obtenus et suggère des pistes de recherche futures.

## Première partie

## Définition de la problématique : contexte général et scientifique

## Chapitre I

## Contexte et enjeux

### I.1 Problématique

Il convient, avant toute chose, d'établir un état des lieux en ce qui concerne l'impact des pesticides sur l'environnement.

#### I.1.1 Consommation des pesticides

La contamination par les produits phytosanitaires constitue une composante importante de la pollution. La France est particulièrement touchée puisqu'elle est le troisième consommateur mondial de pesticides, après les Etats-Unis et le Japon, et le premier utilisateur en Europe (plus d'un tiers des produits). Selon une expertise scientifique réalisée par l'INRA et le CEMAGREF [7], environ 75 000 à 100 000 tonnes de matières actives sont déversées chaque année (voir la Figure I.1).



FIG. I.1 : Tonnage des substances actives vendues en France [7]

Il faut également rappeler que la France occupe, de par sa diversité, la première place Européenne en termes de production agricole avec une surface qui s'étend sur 33 millions d'hectares, dont 62% sont occupés par des terres arables (voir les diagrammes de la Figure I.2).


FIG. I.2 : L'agriculture française en chiffres [1] et [3]

La majorité des pesticides (90%) sont ainsi utilisés à des fins agricoles. La vigne, en particulier, est une culture très consommatrice : elle participe pour 20% à la consommation nationale (Figure I.3).

Cultures	% Surface agricole utilisée « SAU » (arrondi)	Consommation de pesticides (en % du total national)	
Céréales à paille	24 %	40%	
Maïs	7 %		
Colza	4 %	9%	
Vigne	3 %	20%	
Ensemble	38 %	79%	

FIG. I.3 : Consommation de pesticides pour les différentes cultures [7]

Cette situation résulte de l'application d'un nombre important de traitements phytosanitaires lors de chaque saison culturale. Ces produits apparaissent, en effet, comme étant la solution unilatérale pour lutter contre les bio-agresseurs et visent essentiellement à limiter la propagation de deux maladies, l'Oïdium et le mildiou. De même, l'arboriculture fruitière se situe parmi les systèmes de production potentiellement polluants puisqu'elle se caractérise par le recours à une protection phytosanitaire intensive et par une faible évolution des pratiques depuis dix ans. A titre d'information, le verger de pommiers est le plus étendu (54 000 hectares sur les 170 000 nationaux) mais aussi le plus traité. De plus, il est à noter que ces deux cultures occupent une place considérable dans la région Languedoc-Roussillon où se situe notre laboratoire de recherche et font, par conséquent, l'objet de multiples études. Mais, avant de poursuivre cette discussion, il est nécessaire de définir précisément les pesticides.

# I.1.2 Caractérisation des pesticides

Le terme pesticides (mot que l'on pourrait étymologiquement traduire par « tueurs d'hôtes indésirables ») désigne l'ensemble des substances ou des préparations employées pour la prévention, le contrôle ou l'élimination des organismes vivants jugés indésirables ou nuisibles pour les cultures (parasites animaux, végétaux, champignons ou bactéries). Ils appartiennent à la grande famille des produits phytosanitaires, qui englobe plus largement les pesticides et d'autres produits chimiques ou naturels.

Ils sont classés selon leur utilisation générale : herbicides, insecticides, fongicides, acaricide, molluscicides, aphicides ou nématicides.

Revenons rapidement sur les trois principales catégories de produits utilisées. Les herbicides permettent d'éliminer les mauvaises herbes ou les plantes adventices des cultures. Certains d'entre eux agissent à l'intérieur de la plante, ils pénètrent par les feuilles (pénétration foliaire ou par les organes aériens), ou bien par les racines (pénétration racinaire ou par les organes souterrains) : ce sont les herbicides systémiques. Les matières actives migrent alors de cellule en cellule et sont véhiculées par la sève dans les vaisseaux conducteurs. Cette systémie qui s'exerce vers le bas ou vers le haut de la plante est dite « descendante » ou « ascendante ». Les produits absorbés sont amenés jusqu'aux sites d'action, aux points de multiplication végétative (bourgeons, ...). D'autres agissent à l'extérieur par « contact » (action caustique) : il s'agit des herbicides de contact. De plus, ces produits peuvent avoir une action très sélective dans le but d'assurer la protection d'une variété végétale donnée, ou une action non sélective (désherbant total) dans le cas d'un « nettoyage » interculture. D'autre part, leur emploi peut intervenir à différents stades du cycle biologique des mauvaises herbes : germination, plantule, plante.

Le rôle des insecticides est de protéger les plantes contre les insectes. Ils agissent soit directement sur les parasites, soit indirectement après avoir pénétré dans la plante à protéger et donc par systémie. Dans le premier cas, ils peuvent pénétrer à l'intérieur de l'insecte par contact direct, ingestion (voie buccale), inhalation (voie respiratoire). Ces trois modes de pénétration sont souvent à l'origine de l'intoxication de l'insecte, même si chaque insecticide possède des voies d'entrée préférentielles. L'utilisation de ces produits aboutit essentiellement à une altération du système nerveux provoquant la mort des parasites touchés. C'est ce groupe de pesticides qui semble présenter le plus de risques pour l'homme.

Les fongicides, quant à eux, servent à lutter contre les maladies des plantes provoquées par des champignons, des bactéries ou des virus. Ils agissent soit par « contact », soit par « pénétration » ou « systémie ». Leur effet peut être préventif lorsque leur action se situe avant la pénétration du parasite dans les tissus de la plante ou curatif. Les cultures qui consomment le plus ces produits sont les céréales et la vigne.

Les pesticides sont très diversifiés; pour chaque application, il existe, en outre, des sous-classes en fonction de leurs groupes chimiques. On parlera notamment d'insecticides organophosphorés ou organochlorés, chacun étant caractérisé par un mode d'action propre à sa famille chimique. Les organophosphorés, par exemple, agissent sur le système nerveux des ravageurs.

A titre indicatif, sont données sur la Figure I.4 les quantités de produits utilisées suivant leur appartenance.



FIG. I.4 : Tonnage des diverses classes de pestiticides [7]

Les produits phytosanitaires utilisés peuvent se présenter sous forme de poudres mouillables, de liquides pâteux ou de liquides plus ou moins fluides, de granulés solubles. Toutefois, leur application consiste le plus souvent en la pulvérisation d'une bouillie liquide composée d'eau, d'adjuvants et de produits actifs. Afin de faciliter ultérieurement la compréhension, il est préférable, au préalable, de bien définir chacun de ces termes. Les matières actives désignent les substances ou micro-organismes, mais aussi les virus qui exercent une action générale ou spécifique sur les végétaux, partie de végétaux ou produits végétaux. Quelle que soit la catégorie à laquelle elles appartiennent, elles sont regroupées suivant leur structure chimique et forment des familles. L'appartenance à une même famille se traduit généralement par un mode d'action similaire. La plupart du temps, les substances actives ne sont pas distribuées dans leur état initial, mais sous forme de préparations répondant à de multiples critères de sécurité : innocuité vis-à-vis de l'homme, des cultures et de l'environnement (études de toxicologie et de sélectivité). Selon leur formulation, les produits peuvent être élaborés à partir d'une ou plusieurs matières actives. Au cours de la préparation de la bouillie, sont également introduits des adjuvants, à savoir des substances utilisées en mélange extemporané avec un produit formulé, afin d'en changer certaines propriétés physiques, chimiques ou biologiques. Ces adjuvants peuvent être de plusieurs types : anti-mousses, dispersants, solvants et tensio-actifs. Dans le premier cas, il s'agit d'adjuvants insolubles dans l'eau qui préviennent la formation de mousse à la surface de l'eau durant la préparation et l'agitation des bouillies, dans le second, d'adjuvants qui empêchent l'agglomération de particules de matières actives ou des charges inertes. Les solvants rendent quant à eux solubles la matière active, les plus utilisés sont ceux organiques. Enfin, les tensio-actifs, parmi lesquels figurent les émulsifiants, les surfactants et les mouillants visent à augmenter la surface de contact de la goutte sur la plante ou l'insecte et à limiter le lessivage; ils favorisent l'étalement du mélange et son adhésivité sur la cible. On les qualifie à ce titre d'agent mouillant ou adhésivant. Autrement dit, les adjuvants peuvent avoir des rôles divers allant de l'action sur la tension de surface pour permettre une meilleure pénétration (absence de rebond) dans la végétation à la conservation du produit lui-même (maintien de la stabilité des préparations commerciales).

Afin de stopper la progression des mauvaises herbes ou de prévenir l'attaque de parasites, ces produits doivent être appliqués. Cependant, pour être efficaces, ces traitements phytosanitaires doivent être effectués aux stades de développement de la plante conseillés et dans des conditions climatiques favorables. Il est, en effet, indispensable d'intervenir le plus rapidement possible, faute de quoi la lutte contre les parasites devient difficile (champignons installés à l'intérieur des cultures ou dégâts irréversibles causés par les insectes). Préalablement, une prise en compte de la nature de l'espèce cultivée, l'identification du risque, du niveau d'infestation et des conditions liées au milieu (température, humidité) s'avèrent capitales. Les doses utilisées doivent être correctes ; un surdosage présente souvent une nocivité pour les plantes que l'on souhaite protéger (phytotoxicité) et se traduit par un important gaspillage qui peut représenter un danger considérable pour la santé et l'environnement. Un sous-dosage, en revanche, conduit à l'inefficacité du traitement et constitue un coût inutile. Il est donc indispensable d'appliquer les produits avec précision. D'autre part, le matériel de pulvérisation doit être adapté au type de culture considéré et posséder les qualités requises quant à la dose et au type de couverture souhaités. Il doit aussi être convenablement réglé et régulièrement entretenu.

En conclusion, un bon traitement doit satisfaire les quatre objectifs suivants : être efficace, ne pas endommager la culture, écarter tout danger pour le manipulateur et l'environnement (sol, eau, faune et flore, ...), et être raisonné. Dans tous les cas, le but recherché est de réaliser des pulvérisations possédant des populations de gouttes de grosseur déterminée et d'assurer leur dépôt au sol ou plus fréquemment sur les végétaux, avec une certaine densité d'impacts dans les conditions optimales (conditions climatiques, stade de croissance) et en évitant les pertes diverses, en particulier par dérive et ruissellement.

# I.1.3 Impact environmental des pesticides

### I.1.3.1 Un constat alarmant : une contamination généralisée

Les pesticides appliqués en agriculture contaminent significativement l'environnement. Ces dernières années, de nombreux pesticides ont fait l'objet d'interdiction ou de réévaluation. Face à ce marché en continuelle évolution, les études scientifiques passées ne sont pas toujours représentatives de l'état actuel de la pollution par les produits phytosanitaires, mais elles soulignent clairement la présence de pesticides et de leurs produits de dégradation dans tous les compartiments de l'environnement. Toutes ces molécules imprègnent les sols, contaminent les aliments, affectent la biodiversité et la santé de l'homme (voir Figure I.5).



FIG. I.5 : Les différentes voies d'exposition [6]

Elles agissent aussi indirectement sur notre environnement à partir des vecteurs de

diffusion que sont l'air et l'eau. On les retrouve notamment sous forme aqueuse : dans les eaux des rivières, les eaux usées, les eaux souterraines et les eaux de pluie. En 2004, les pesticides étaient présents sur une grande partie de l'échantillon français des points de mesure (607 points interprétables des réseaux de connaissance générale) : une des substances actives recherchées a été quantifiée au moins une fois dans respectivement 96% des points de mesure des cours d'eau et dans 61% des points de mesure des nappes souterraines [26]. Plus grave encore, les niveaux de contamination étaient souvent significatifs : la moitié des eaux de surface étudiées avaient une qualité « moyenne à mauvaise ». Près d'un tiers des eaux souterraines nécessiteraient un traitement spécifique d'élimination des pesticides si elles étaient utilisées pour la production d'eau potable.

Maintes études ont aussi mis en évidence la présence, dans l'atmosphère, de pesticides à la fois pendant et hors période de traitements, en milieu rural comme en milieu urbain. Certains produits interdits à l'utilisation depuis plusieurs années, à l'exemple du Lindane, sont même détectés, soulignant ainsi une contamination chronique du compartiment aérien.

Les données concernant la contamination des aliments végétaux consommés sur le marché français sont également préoccupantes. En 2001, plus de la moitié des échantillons analysés contenaient un ou plusieurs résidus de pesticides et plus de 6% en renfermaient à une dose supérieure aux Limites Maximales en Résidus. Un programme de contrôle coordonné au sein de l'Union Européenne montre à ce sujet que certains aliments sont plus fréquemment contaminés que d'autres par des résidus de pesticides. C'est le cas, par exemple, pour les laitues ou les fraises (65% des échantillons contaminés par des résidus) ou encore les raisins de table (61% des échantillons contaminés). Ces produits finissent finalement dans nos organismes, apportés là par l'eau et les aliments consommés.

Cependant, les pesticides sont, par définition, des Polluants Organiques Persistants (POP) et présentent, par conséquent, une toxicité. Leur accumulation dans les chaînes alimentaires affecte l'homme et les espèces vivantes. Chaque année, des centaines de millions d'abeilles et d'insectes utiles sont tués de par le monde par aspersion de pesticides. Or ces insectes nous apportent directement ou indirectement le tiers de notre alimentation. En effet, la majorité des arbres fruitiers ne peuvent fructifier que si les abeilles les pollinisent et il en va de même, dans une large mesure, pour les plantes fourragères servant de nourriture au bétail. Mais, surtout, les pesticides posent un véritable problème de santé publique, et pas seulement pour les utilisateurs qui sont les plus exposés, mais aussi pour la population générale. Deux types d'intoxication peuvent être observés : aiguë avec une manifestation immédiate des symptômes ou chronique avec apparition d'une pathologie après des expositions répétées dans le temps. Dans ce dernier cas, l'épidémiologie souligne le développement de cancers, de malformations congénitales, la survenue de problèmes d'infertilité, de problèmes neurologiques ou encore une altération du système immunitaire. Alors que les sources d'exposition professionnelle aux pesticides découlent directement de l'emploi qui en est fait (production, traitement des cultures ou des animaux, programmes de santé), la population générale est essentiellement exposée au travers de son alimentation et de son environnement. L'action des pesticides est le plus souvent insidieuse. En 1989, l'OMS estimait que les pesticides étaient à l'origine d'un million d'empoisonnements graves et de 220 000 morts par an dans le monde. Ainsi, il existe un véritable risque sanitaire et environnemental chronique, pour les milieux naturels et la ressource en eau, pour l'homme, et donc pour sa qualité de vie.

Comprendre et prévoir les risques de contamination du milieu naturel implique que

soient identifiées et décrites les voies de dissémination des produits : volatilisation, transferts associés à la circulation de l'eau, adsorption par le sol, transformation physicochimique ou biologique ... Cependant, les mécanismes impliqués sont encore mal connus et constituent aujourd'hui encore un objet de recherche majeur. Il est très difficile de dégager un comportement général pour les pesticides. Cette complexité s'explique par le fait que les mélanges épandus sont en général composés de multiples produits (additifs, colorants, tensioactifs, conditionneurs ...) qui appartiennent à des familles chimiques très diverses et par conséquent réagissent différemment dans l'environnement. Leur impact dépend à la fois de leur mode d'action (certains sont beaucoup plus toxiques que d'autres), de leur persistance dans le temps (certains se dégradent beaucoup plus rapidement que d'autres) et de leurs sous-produits de dégradation lesquels sont parfois plus toxiques et se dégradent moins vite que le composé initial.

## I.1.3.2 Dispersion et devenir des pesticides dans l'environnement

Les mécanismes de dispersion (voir Figure I.6) sont très nombreux et dépendent principalement de la végétation, des propriétés du sol, des conditions climatiques, et de la composition des produits épandus.



FIG. I.6 : Voies et mécanismes de dispersion dans l'environnement [84]

Une fois appliqués, les pesticides peuvent, en effet, ensuite être soumis à différents phénomènes de transport. Ils sont entraînés vers les cours d'eau par le ruissellement érosif, soit sous forme dissoute soit sous forme solide, fixés sur les particules de sol transportées. Ces transports en surface ou en profondeur conduisent à la contamination des eaux de surface et des nappes phréatiques, même si les quantités de pesticides mobilisées dans les processus de transfert ne concernent généralement qu'une faible fraction des quantités épandues. Les composés les plus solubles peuvent, soit ruisseler lorsque les précipitations dépassent les capacités de rétention et d'infiltration du sol, soit s'infiltrer si les pluies sont de faible intensité et le sol déjà humide et non saturé. Certains pesticides peuvent également se coller sur des poussières qui sont ensuite elles-mêmes entraînées par le vent. Ils se retrouvent ainsi dans l'atmosphère sous forme solide. En présence de courants aériens, les distances parcourues peuvent atteindre plusieurs milliers de kilomètres. Des zones non ciblées ainsi que des villes sont ainsi contaminées par des pluies ou des brouillards pollués.

L'atmosphère joue un rôle primordial dans le transport à moyenne ou longue distance de nombreux composés organiques rémanents. Une part importante des pesticides utilisés par l'agriculture est entraînée dans l'atmosphère suivant divers processus dans des proportions parfois élevées.

Les pesticides sont introduits dans l'air par deux mécanismes principaux : la dérive lors de l'application et la volatilisation qui peut avoir lieu plusieurs jours, semaines voire plusieurs mois après le traitement. Les produits phytosanitaires peuvent se volatiliser d'une part au niveau de la surface des plantes et d'autre part, au niveau des sols traités par érosion éolienne. Ils peuvent également être entraînés par le ruissellement des eaux de pluie dans les rivières, et ensuite se volatiliser dans l'atmosphère (Figure I.7).



FIG. I.7 : Transfert des pesticides dans l'environnement [6]

Dans un premier temps, décrivons la volatilisation. On s'attardera ensuite sur la dérive car elle se situera au cœur de nos préoccupations de recherche. Le terme « volatilisation » désigne l'ensemble des procédés physico-chimiques de transfert des composés à partir des végétaux ou du sol vers l'atmosphère. Cette voie de transfert est encore peu renseignée. Des modèles existent, mais peu de jeux de données sont disponibles pour permettre leur validation. Toutefois, l'on peut dire que ce phénomène peut se poursuivre sur de longues plages de temps et explique la détection des pesticides en dehors des périodes de traitement. La volatilisation est fonction essentiellement des propriétés physico-chimiques des pesticides (solubilité dans l'eau, ...), mais est également influencée par les conditions météorologiques (ensoleillement, température élevée, hygrométrie, mouvement d'air, ...) ainsi que la nature de la surface d'absorption du pesticide. A titre d'exemple, la volatilisation est plus significative à partir des feuilles que du sol. Certains pesticides peuvent « s'adsorber » c'est-à-dire se fixer sur des surfaces solides, en l'occurrence le sol et peuvent ensuite être emportés par le vent et se retrouver ainsi dans l'atmosphère : il s'agit du mécanisme d'érosion éolienne. Ce phénomène dépend essentiellement des facteurs suivants : vitesses de vent, nature et humidité du sol, couvert végétal, taille des particules, et pratiques culturales. Dans ce cas, souvent les grosses gouttes roulent au sol et se déplacent dans la direction du vent sur quelques centaines de mètres. Elles sont en général déposées à proximité de la zone traitée. En revanche, les plus petites particules (dont le diamètre est inférieurs à 20 microns) sont entraînées préférentiellement dans l'atmosphère, elles peuvent avoir un temps de résidence de l'ordre de la semaine et sont ensuite capables de parcourir plusieurs centaines de kilomètres. Il faut cependant noter que la présence de haies ou de rangées d'arbustes peut limiter ce phénomène qui par ailleurs semble ne pas représenter la contribution la plus importante à la pollution.

Au moment de l'application, une partie des produits phytosanitaires n'atteint pas les surfaces traitées. Cette « perte de composés » qualifiée de dérive (voir Figure I.8) est fortement influencée par les modes d'applications ainsi que les conditions climatiques (température, hygrométrie, vitesse et orientation du vent, ...). Par exemple, par temps chaud et sec, ce mécanisme est très important. La vitesse du vent est le facteur météorologique ayant le plus d'effet sur ce phénomène. Plus les vents sont forts, plus la dérive est importante. Par conséquent, il est primordial de traiter pendant les heures relativement calmes de la journée, au petit matin ou en début de soirée. La dérive varie également en fonction des propriétés physiques des bouillies appliquées, des conditions locales (topographie du terrain, type de sol), et du choix et du réglage des matériels de pulvérisation (hauteur des rampes, calibrage des buses, ...). Elle peut entraîner des dépôts de produits phytosanitaires dans des zones non ciblées et avoir de graves conséquences : contamination de la surface traitée, des alentours et de l'eau, risque de surdosage, dégâts sur les cultures contiguës sensibles, et risques sanitaires pour la faune environnante et les humains. Les figures I.8(a) et I.8(b) ci-dessous soulignent l'importance de ce phénomène lors de pulvérisations en arboriculture et en viticulture.



(a) en viticulture

(b) en arboriculture

FIG. I.8 : Dérive lors des pulvérisations

De manière globale, les pesticides pénètrent dans l'atmosphère dans les régions chaudes ou tempérées; ils sont ensuite transportés via le cycle de l'eau et les masses d'air sur des milliers de kilomètres, et finalement se condensent au niveau des régions froides de la planète, à savoir les zones de hautes montagnes et celles polaires. De fortes concentrations de pesticides sont ainsi détectées dans les régions les plus reculées du globe comme en témoigne la contamination des Inuits, esquimaux du Nord Canada [46]. En outre, ces composés peuvent subir des dégradations chimiques ou photochimiques et participer ainsi au mécanisme réactionnel atmosphérique en produisant des aérosols et des polluants secondaires tel que l'ozone.

Au final, il en résulte que les pesticides provenant de l'atmosphère peuvent polluer les différents écosystèmes. Une bio-accumulation des pesticides, sous leur forme épandue ou dégradée, est d'ailleurs observée dans l'environnement.

# I.1.3.3 Deux facteurs prépondérants dans la dispersion des pesticides : la taille et la vitesse des gouttes

Les caractéristiques des gouttes produites en sortie de buses au niveau des pulvérisateurs jouent un rôle déterminant sur le transport, le dépôt, la répartition et l'efficacité des épandages. La dérive des produits phytosanitaires dépend principalement de la taille des gouttes pulvérisées. La Figure I.9 montre la correspondance entre la taille des gouttelettes et le risque de dérive.

Taille	Dimension	Fixation sur les feuilles	Risque de dérive
Très fines	< 90 µm	Bonne	Très élevé
Fines	90 à 200 µm	Bonne	Elevé
Moyennes	200 à 300 µm	Bonne	Moyen
Grosses	300 à 450 µm	Moyenne avec risque de ruissellement	Faible
Très grosses	> 450 µm	Risque de ruissellem ent	Très faible

FIG. I.9 : Risque de dérive en fonction de la dimension des gouttelettes [7]

Les gouttes les plus soumises à ce phénomène sont en général de petite taille, avec un diamètre inférieur à 150 microns; elles s'évaporent rapidement ou bien sont facilement transportées en dehors de la surface à traiter par le vent ou d'autres facteurs climatiques. A l'inverse, les gouttes trop grosses peuvent ruisseler le long de la végétation. Par ailleurs, des gouttes trop lentes peuvent être emportées par les masses d'air ou bien se déposer au sol avant d'atteindre la cible, alors que des gouttes ayant une énergie cinétique trop importante auront tendance à rebondir sur la plante. En d'autres termes, suivant leur taille et leur vitesse d'éjection, les gouttes vont se distribuer différemment entre les différents compartiments de l'environnement.

Lors de l'application, la difficulté consiste à trouver un compromis entre des pulvérisations de gouttes relativement fines (quelques dizaines de microns) permettant une couverture plus importante des surfaces traitées (voir Figure I.10) mais largement soumises à la dérive et des pulvérisations constituées de gouttes plus grosses conduisant à une répartition moins importante et à un éventuel ruissellement, et nécessitant l'emploi de quantités de pesticides plus importantes, mais induisant une dérive moindre.



FIG. I.10 : Couverture de la cible

Or la taille et la vitesse des gouttes dépendent principalement de la géométrie interne des buses de pulvérisation et de la pression d'injection, des propriétés physiques des solutions appliquées et des conditions ambiantes. Ces facteurs ont des effets significatifs sur la formation des sprays et le comportement des gouttes qui les composent. Il est donc intéressant de présenter les buses ainsi que les pulvérisateurs sur lesquels elles sont utilisées.

# I.1.3.4 Techniques et matériels de pulvérisation

Cette section est uniquement destinée à dresser un inventaire rapide des procédés utilisés, des mécanismes mis en jeux et de leurs limites respectives. Elle est *a priori* indispensable à une bonne compréhension des sources de dispersion des pesticides et des progrès technologiques possibles. Elle permet aussi de replacer le matériel sélectionné par rapport au contexte général et par suite, de justifier son choix dans le cadre de la présente étude.

Dans tous les cas, il faut tout d'abord rappeler qu'un certain nombre de conditions sont nécessaires pour optimiser une application : maintenir l'appareil dans un état de fonctionnement correct, optimiser ses réglages en fonction de la culture à traiter, respecter des conditions climatiques standardisées (vent faible, hygrométrie élevée) et éviter les phénomènes météorologiques ponctuels (pluies).

Les buses sont un des éléments clés de l'application des produits phytosanitaires par voie de pulvérisation; elles sont le dernier point de contact avant que le pesticide ne soit déposé dans l'environnement. Elles assurent le calibrage du débit, et conditionnent la forme du jet, la quantité et la dimension des gouttes. De leurs performances dépendront la réussite et l'efficacité du traitement.

La majorité des buses de pulvérisation se présentent sous forme d'orifices calibrés au travers desquels doit passer le liquide sous pression. A sa sortie dans l'atmosphère, le jet liquide se désintègre en gouttelettes qui atteignent la cible et donnent lieu à une répartition plus ou moins uniforme. Les buses sont classées en fonction du profil du nuage de gouttelettes qu'elles produisent. Les catégories les plus communes sont les buses à fente, les buses à turbulence et les buses à miroir (voir Figure I.11).



FIG. I.11 : Les formes de jet des buses classiques [17]

Les **buses à fente** doivent leur appellation à la forme elliptique étroite de leur orifice d'écoulement en opposition aux orifices à section circulaire. Elles produisent un jet plat souvent appelé jet pinceau. Dans ce dispositif, le processus de fragmentation du liquide peut se résumer de la façon suivante : dès la sortie de l'orifice, se forme une nappe liquide continue, puis, sous l'effet des forces de pression, le film liquide s'étire et finit par se fractionner. Le jet obtenu présente un certain angle au sommet et une certaine épaisseur dans le plan perpendiculaire au plan du jet. Les plus grosses gouttes sont produites sur le bord des fentes et se situent par conséquent à la périphérie du jet, principalement sur les deux extrémités. Ces buses sont caractérisées par leur débit à une pression de référence et par l'angle du jet qui le plus souvent possède une valeur de 80 ou 110°. La finesse des gouttes est fonction du calibre de la buse, de la pression, et de l'angle du jet. Les buses à jet plat sont généralement utilisées à basse pression (2 à 4 bars). Elles produisent peu de gouttelettes avec un très faible diamètre. Elles sont utilisées pour la plupart des traitements phytosanitaires (fongicides, insecticides, herbicides), notamment pour les traitements de cultures basses. Les recherches menées se limitent principalement à ces buses étant donné leur usage répandu en agriculture.

Les buses à turbulence sont aussi appelées buses à jet conique. Elles sont composées de trois éléments principaux : des canaux tangentiels, une chambre de turbulence (aussi nommée chambre de swirl) et un orifice de sortie. Les canaux sont essentiels; ils ont pour rôle de mettre le bouillie en rotation avant son arrivée dans la chambre de turbulence. Leurs caractéristiques géométriques et leurs dimensions déterminent la physionomie du jet. La chambre de turbulence est la capacité qui définit le type de buse. Elle peut avoir la forme d'un cône ou d'un tronc de cône. L'orifice de sortie possède un diamètre qui varie généralement de 8 à 30 dixièmes de millimètre. L'usinage de cet orifice doit être aussi parfait que possible afin d'éviter la déformation du jet et du spectre de pulvérisation. Le mouvement amorcé par les canaux se poursuit dans la chambre de swirl et le liquide s'échappe par l'orifice circulaire sous la forme d'un jet conique dont l'axe coïncide avec celui de la buse. L'angle du jet émis peut être de 80° ou plus selon la géométrie et les dimensions de la buse. Les pulvérisations sont d'autant plus fines que les pastilles sont de petit calibre et que la pression est importante. L'analyse des jets fournis indique la présence d'une couronne conique formée de gouttelettes relativement grosses à la périphérie du jet et, au centre, de gouttes fines; un effet d'entraînement des petites gouttes par la masse d'air mise en mouvement par la couronne des grosses gouttes est également observé. Les sprays obtenus sont habituellement constitués de gouttes fines ou moyennes. Ces buses

sont essentiellement employées pour la pulvérisation des fongicides et des insecticides en arboriculture et viticulture. En revanche, leur emploi est à proscrire pour les traitements herbicides, car la pulvérisation résultante comporte une fraction considérable de gouttes très fines fortement sensibles au vent, même léger, et nocives pour les cultures avoisinantes.

Les **buses à miroir** sont également qualifiées de buses à impact. Avec ce matériel, le liquide est éjecté à travers un orifice tangentiellement à la courbure d'un déflecteur dont la surface, appelée miroir, est bien lisse. Le filet de liquide est applati en éventail sur ce déflecteur. Cet éventail est ensuite éjecté perpendiculairement à l'axe de ce filet. Il en résulte une pulvérisation relativement grossière sur un angle de l'ordre de 100 à 150°. Ces buses produisent une distribution irrégulière au sol de la bouillie. Cependant, leurs angles larges leur donnent quelque intérêt pour des applications localisées d'herbicides en arboriculture et en viticulture.

Toutes ces buses sont susceptibles de générer de la dérive lors du traitement. Afin de limiter ce phénomène, les constructeurs ont élaboré ces dernières années de nouvelles buses, dites à **dérive limitée** :

#### – les buses basse pression

L'intérêt majeur de ces buses est de pouvoir travailler à de faibles pressions tout en conservant un angle de jet constant (dès 1 à 1,2 bars) à la différence des buses classiques. Cela permet de limiter la formation de fines gouttelettes et par conséquent de réduire la dérive.

#### – les buses à pastille de calibrage

Une pastille calibrée positionnée en amont de la buse délimite une chambre de décompression. Le calibre de cette pastille détermine le débit. La chute de pression qui intervient à l'intérieur de la chambre située en aval permet d'obtenir des gouttelettes dont la taille est supérieure à celle fournie par une buse à fente classique de même calibre.

## – les buses de type miroir

L'orifice de calibrage débouche sur une chambre de décompression , ce qui se traduit par la production de gouttes assez grosses. Un jet aplati se forme pour des pressions relativement basses et son angle peut être très ouvert.

## – les buses à injection d'air

Ces buses ont été développées très récemment dans un souci de protection de l'environnement. Le principe consiste à charger les gouttes d'eau de bulles d'air pour accroître leur taille. Dans ces buses, l'air est aspiré par simple effet venturi, par l'intermédiaire d'orifices d'aspiration (Figure I.12). Le mélange d'air et de liquide ainsi obtenu est ensuite éjecté à faible vitesse, ce qui génère de très grosses gouttes chargées d'air. Selon les concepteurs, les gouttes finiraient par éclater sur la cible de part l'air qu'elles contiennent, libérant plusieurs impacts garantissant ainsi une bonne couverture. De par leur nouveauté et leur complexité, ces buses ont été assez peu étudiées et peu de données expérimentales à leur sujet sont disponibles.



FIG. I.12 : Schéma de la buse à injection d'air [17]

En comparaison avec les buses à fente classiques, les buses anti-dérive (voir aussi Figure I.13) présentées ci-dessus permettent de réduire la dérive de plus de 40%. Les buses à injection d'air semblent les plus performantes à ce titre et permettraient même une réduction de plus de 75% de ce phénomène. Leur utilisation est d'ailleurs recommandée pour les traitements en arboriculture et viticulture.

	Fente (classique)	Basse pression	Pastille de calibrage	Type miroir	Injection d'air
Pression d'utilisation	1.7 à 3 bars	1 à 3 bars	1.8 à 3 bars	1 à 3 bars	2,5 à 8 bars
Angle de jet	80 et 110°	80 et 110°	110°	110 à 150°	100 à 120°

FIG. I.13 : Figure récapitulative des buses à dérive limitée [17]

Toutefois, si ces dispositifs permettent de limiter considérablement les phénomènes de dérive, ils peuvent parfois occasionner des problèmes de surdosages locaux.

Par ailleurs, les différentes buses décrites précédemment sont la plupart du temps fixées sur des pulvérisateurs. Ces appareils de traitement réalisent la fragmentation des préparations en gouttelettes plus ou moins fines sous la forme d'un jet projeté, ou d'un jet porté par un flux d'air, orienté vers les organes aériens des plantes à protéger ou vers le sol. Suivant le mode de fragmentation utilisé, il est possible de distinguer différents types de pulvérisateurs :

## - jet projeté

La pulvérisation par jet projeté est le procédé actuellement le plus répandu (désherbage, grandes cultures ou arboriculture-viticulture en traitement face par face). Il s'agit du système de pulvérisation le plus simple. Une pression de liquide imposée en entrée d'une buse assure la mise en vitesse et la rupture de la nappe qui se forme en sortie. Cette fragmentation donne naissance à un nuage de gouttes de différentes tailles et vitesses. La forme et la composition du spray dépendent à la fois du type de buse utilisé et des caractéristiques physiques de la préparation liquide. Les performances de ce procédé sont bonnes à très bonnes à condition de respecter la distance entre la buse et la cible à atteindre de manière à avoir un bon recouvrement des sprays. Les appareils à jet projeté utilisés en désherbage n'occasionnent que peu de pertes dans l'environnement (10% au maximum et dans l'air). Les matériels utilisant ces principes sont principalement utilisés pour le traitement des cultures basses.

# – jet porté

L'assistance d'air permet de guider les sprays en sortie de buse et d'accroître la turbulence du flux afin d'améliorer la pénétration et le dépôt. Elle permet *a priori* de réduire l'influence des conditions externes (vent,...) et facilite ainsi la pénétration dans la végétation. Pour les grandes cultures, ces techniques sont peu développées en France. Pour les pulvérisateurs arboricoles et viticoles, pour lesquels ces techniques ont été spécialement développées, l'assistance d'air est nécessaire mais s'accompagne de pertes certaines vers le sol et l'atmosphère. Les différences de vitesse entre l'air et les gouttes peuvent, par ailleurs, favoriser l'évaporation. A ce propos, certains dispositifs de traitement face par face et à très faible distance diminuent considérablement la dérive. Enfin, pour ce type de dispositif, il est particulièrement important que le volume de pulvérisation soit en adéquation avec le stade de développement de la végétation. Des méthodes de réglage et des systèmes automatiques sont d'ailleurs proposés pour remédier à ce problème.

## - pneumatique

Dans un procédé pneumatique, l'éjection de la nappe liquide est assurée par un flux d'air produisant une dépression dans un venturi. Ce système est robuste et conduit à des sprays dont le diamètre des gouttes est plus faible. Cela présente l'avantage de limiter les doses appliquées mais rend la pulvérisation plus sensible à la dérive. Ce mode de pulvérisation est quelquefois utilisé en grande culture et la plupart du temps pour les traitements viticoles et arboricoles. Considéré en France comme très efficace en termes de dépôts, ce procédé est quasiment banni dans les pays d'Europe du nord car il semble *a priori* générer davantage de pertes dans l'atmosphère (les vitesses d'air étant plus élevées que sur le jet porté). Les déperditions dans l'environnement peuvent, en effet, être très importantes suivant les configurations. Toutefois, comme précédemment, il est tout à fait possible de réduire fortement ces phénomènes par un réglage adapté des appareils.

## - centrifuge

La pulvérisation centrifuge utilise les forces centrifuges pour mettre en mouvement le liquide qui se fractionne ensuite. La bouillie est introduite à faible pression au centre de disques ou de cylindres rotatifs tournant à grande vitesse. La finesse de la pulvérisation augmente avec la vitesse de rotation. Ce procédé limite la largeur du spectre du diamètre de gouttes. Les diamètres médians de gouttes sont très faibles ce qui rend cette technique particulièrement adaptée à des traitements manuels, localisés et à très faible dose. Son utilisation sur des machines motorisées est néanmoins limitée pour des raisons de coûts et d'encombrement.

# – électrostatique

Quel que soit le dispositif de pulvérisation, l'usage de dispositifs électrostatiques permet d'accroître notablement la part de produits arrivant sur les feuilles. L'intérêt de ce procédé est toutefois nuancé par son domaine d'utilisation car plusieurs paramètres peuvent fortement atténuer son efficacité (type de végétal, surface des feuilles, conditions hygrométriques). Concrètement, les dispositifs existants sont majoritairement utilisés en maraîchage.

# - traitements aériens

Les traitements aériens constituent un cas à part mais s'avèrent incontournables dans certaines configurations (sols non porteurs, cultures inaccessibles, traitements sur surfaces aquatiques, forêts,...). Des hélicoptères ou des avions équipés de rampes à jet projeté sont utilisés (voir Figure I.14). Suivant les surfaces à traiter, les techniques diffèrent. En viticulture par exemple, les passages se font à basse vitesse et à très faible hauteur. De récentes études ont à ce propos montré l'intérêt d'équiper ces appareils de buses limitant la dérive ou d'utiliser des additifs, afin d'augmenter le diamètre des gouttes pulvérisées. Dans tous les cas, les pertes dans l'environnement sont toujours plus significatives que pour des applications terrestres.



FIG. I.14 : Pulvérisation aérienne

Les principaux types de pulvérisateurs et leurs caractéristiques sont résumés sur la Figure I.15 suivante :

Type de pulvérisateur	Jet projeté	Jet porté	Pneumatique
Principe de fonctionnement	Mise sous pression du liquide, passage à travers un orifice calibré	Idem projeté + transport des gouttelettes par un fort courant d'air (turbine hélicoïde)	Formation des gouttes et transport par un flux d'air à grande vitesse (300-500 km/h)
Pression de travail	0.5-15 bars en fonction du type de buse et de l'objectif	5-15 bars en fonction du diamètre de goutte recherché	< 3 bars : la pression sert à dose, pas à diviser
Type de buse utilisé	Fente, miroir, turbulence	Turbulence	Pastilles
Utilisation	Essentiellement les cultures de plein champ (+ désherbage en cultures pérennes et pendillards en vignes étroites)	Essentiellement les cultures pérennes	Essentiellement les cultures pérennes

FIG. I.15 : Les principaux types de pulvérisateurs [17]

Selon le cas, ils peuvent être de trois types : porté (Figure I.16(a)), traîné (Figure I.16(b)) ou automoteur (Figure I.16(c)). Pour l'arboriculture et la viticulture, il s'agit principalement de pulvérisateurs portés et traînés.



FIG. I.16 : Différents pulvérisateurs

Comme on l'a vu, il est possible de limitier la dérive des pesticides grâce aux innovations techniques (buses anti-dérive). De telles évolutions technologiques sont à privilégier mais ne semblent pas encore suffisantes. Par ailleurs, leur mise en œuvre nécessite une connaissance approfondie des divers mécanismes mis en jeux lors de la pulvérisation de produits sur la cible végétale. Il est donc fondamental de réaliser des études en amont de ce procédé car ces contributions auront un effet tangible en termes de réduction des pollutions environnementales.

# I.2 Objectifs et méthodologie

Face à l'ampleur des pollutions générées par les pesticides, une seule solution : mieux évaluer les pesticides pour interdire *a priori* tout ceux qui présentent un potentiel toxique pour l'homme et surtout **diminuer considérablement leur usage et les pertes en dehors de la zone ciblée**.

Pour y contribuer, plusieurs approches sont envigeasables.

La pulvérisation agricole a longtemps été abordée par une approche exclusivement expérimentale; cela a permis entre autres de constituer des bases de données de mesure de dérive ou de dépôt en fonction d'un certain nombre de facteurs comme le type de buse, la végétation ou la vitesse du vent latéral. Néanmoins, ces expérimentations en champ ont un coût très élevé et sont particulièrement lourdes à mettre en œuvre. Elle sont, en outre, soumises à des conditions environnementales (orientation et vitesse de vent, température, hygrométrie, structure de la végétation, etc.) fluctuantes. Plusieurs équipes ont ensuite approché le problème via l'élaboration de modèles, issus de ces bases de données expérimentales. Ces modèles ont permis entre autres d'estimer les pertes de produit par dérive [31] ou de décrire les trajectoires de gouttes en pulvérisation aérienne [94]. Cependant, ils sont globaux et reposent sur de lourdes hypothèses simplificatrices.

Des études plus spécifiques ont été menées aussi sur les sprays agricoles. La plupart concerne essentiellement des écoulements monophasiques liquides (sprays issus de buses à fente). L'influence de différents adjuvants sur les caractéristiques du jet en termes de taille et de vitesse de gouttes y a été sondée [29, 62]. Ces travaux ont notamment permis de prédire l'angle du spray en fonction de la forme de la buse [106].

Par ailleurs, des équipes travaillent sur la modélisation des trajectoires de gouttes à l'aide de codes de calculs commerciaux. La fragmentation du jet liquide est alors supposée déjà réalisée; le diamètre et la vitesse des gouttes injectées, ainsi que leur angle de dispersion sont imposés [14, 104] arbitrairement.

En conclusion, qu'il s'agisse d'expérimentation ou d'études théoriques, les méthodologies développées jusqu'ici ne s'avèrent pas suffisantes pour répondre à la problèmatique.

Afin de mieux maîtriser la pulvérisation, il apparaît impératif d'éviter la formation de gouttes fortement polluantes de par leurs caractéristiques. Pour y parvenir, le phénomène de fragmentation du liquide en sortie de buse est alors l'élément majeur à prendre en compte car il contribue directement à la composition des nuages de gouttes.

Les outils laser disponibles en laboratoire ne permettent de mesurer des tailles, et vitesses de gouttes que lorsque celles-ci sont assez éloignées les unes des autres. Par conséquent, pour évaluer précisément les caractéristiques des gouttes à la sortie des buses, c'est-à-dire en milieu très dense en liquide, les techniques laser classiques ne sont pas adaptées, et la non-sphéricité éventuelle des structures liquides (ligaments, amas, ...) fausse aussi les résultats obtenus.

La modélisation s'avère alors très intéressante, pour remédier au manque de mesures. C'est pourquoi notre étude a été consacrée à la **modélisation de l'atomisation des jets de pulvérisation**. Cette approche permet de pouvoir étudier ce qui se passe à l'intérieur même des buses et qui va influencer l'écoulement en aval. Elle permet de prédire les tendances résultant de modifications de conditions initiales ou aux limites imposées. Elle autorise également une variation aisée des paramètres contrairement à l'expérience, qu'il s'agisse de paramètres d'application (pression d'injection), climatiques ou encore de propriétés physiques des formulations (tension superficielle, viscosité). Ce type d'approche présente également l'avantage de différencier l'influence respective de plusieurs facteurs, ce qui est d'autant plus intéressant lorsqu'il y a des interactions fortes entre eux. L'approche par modélisation permet enfin d'attribuer des valeurs extrêmes à des paramètres qui ne pourraient être atteintes expérimentalement et de reproduire un grand nombre d'expériences en un temps limité.

Ces travaux de recherche s'inscrivent dans une **démarche globale** dont l'objectif est de développer des outils de compréhension des phénomènes mis en jeux lors des pulvérisations de produits phytosanitaires et de concevoir des équipements innovants pour les opérations de protection (pulvérisations, procédés alternatifs) et d'entretien des cultures viticoles; ils viennent compléter les acquis de l'équipe, très importants déjà en termes de connaissance des applications. L'enjeu est de parvenir *in fine* à **optimiser les procédés actuels**.

# Chapitre II

# Synthèse bibliographique sur l'atomisation des jets

« On ne connaît pas complètement une science tant qu'on en sait pas l'histoire. » Auguste Comte

Afin de mieux comprendre la formation du spray en sortie de buse, dans ce chapitre, sont exposées les principales connaissances disponibles concernant la fragmentation d'un jet liquide et les différents phénomènes qui en sont à l'origine. Dans un premier temps, on essaiera de définir clairement l'atomisation et de présenter les différentes grandeurs permettant de caractériser un jet liquide. Ensuite, les principaux modèles d'atomisation développés jusqu'ici seront passés en revue en mettant en lumière leurs avantages et leurs limitations respectifs. Enfin, la présentation et la confontration des diverses méthodes de modélisation pour les écoulements diphasiques nous permettra de choisir parmi ces approches celle qui sera la plus adaptée pour notre étude.

# II.1 L'atomisation et sa terminologie

De manière générale, l'atomisation désigne l'action de séparer un corps en gouttelettes ou en particules. Ce phénomène intervient dans de nombreux domaines et procédés industriels tels que l'injection de carburant dans les chaudières industrielles, les fours, les moteurs à combustion interne ou les peintures, et présente une importance capitale. La structure des jets est essentielle pour permettre à ces systèmes d'atteindre des performances maximales.

L'atomisation d'un liquide, plus précisément, est l'opération qui correspond au passage d'un volume continu de liquide à un ensemble de gouttes caractérisé par une distribution de tailles et de vitesses.

Dans le cadre de la pulvérisation agricole, il s'agit de fragmenter les solutions de pesticides en fines gouttelettes de manière à obtenir un nuage de gouttes qui permette une répartition et une efficacité optimales des traitements appliqués.

L'atomisation d'un jet liquide comporte classiquement deux étapes (voir Figure II.1) : la première, l'atomisation primaire, correspondant à la formation de fragments liquides, sphériques ou non, à la surface du jet, et la seconde, l'atomisation secondaire désignant la cassure supplémentaire de ces éléments liquides en gouttelettes plus fines.



FIG. II.1 : Breakup primaire et secondaire (d'après Hermann [37])

Pour notre étude, nous nous contenterons d'explorer la sortie de l'injecteur, et nous nous limiterons donc au fractionnement primaire. De plus, nous nous intéresserons plus particulièrement aux jets obtenus, lors de pulvérisations agricoles, avec des buses à turbulence, et dont la particularité est d'être coniques et creux.

Cependant, la plupart des études réalisées dans la littérature concerne des jets ronds (pleins et cylindriques) comme ceux présents dans les moteurs Diesel. C'est pourquoi, dans un premier temps, seront présentés brièvement les différents régimes de fractionnement de ce type de jets.

# II.1.1 Grandeurs caractéristiques

Dans cette section, sont définies les diverses grandeurs permettant de caractériser un jet liquide évoluant dans un milieu gazeux, qu'il soit stationnaire ou instationnaire.

Pour caractériser la pénétration d'un **jet stationnaire**, deux longueurs caractéristiques sont utilisées : la longueur de surface intacte  $L_{su}$  et la longueur de cœur liquide  $L_{co}$ (Figure II.2).



FIG. II.2 : Fractionnement d'un jet à faible vitesse d'injection [91]

La longueur de surface intacte,  $L_{su}$ , correspond à la distance entre la sortie de la buse et l'endroit sur la surface du jet où se produit le fractionnement primaire. La longueur de coeur liquide, appelée aussi longueur de noyau liquide intact,  $L_{co}$ , est une notion plus floue : elle peut être définie de deux façons. Il peut s'agir de la distance sur l'axe le long de laquelle le jet est continu, autrement dit, de la distance du point d'injection au point où est observée la première déconnexion du jet liquide. Certains auteurs, comme Lambert [48] et Vallet [100], définissent la longueur de coeur liquide de manière pragmatique comme la distance sur l'axe entre le nez de l'injecteur et la zone où la fraction massique du liquide atteint 95%. Classiquement, pour des jets à basse vitesse d'injection, les deux longueurs caractéristiques  $L_{su}$  et  $L_{co}$  existent et sont bien distinctes. Par contre, avec de fortes vitesses injection (atomisation), la longueur de surface intacte tend vers zéro puisque le liquide se fragmente dès sa sortie de l'injecteur.

Il faut, de plus, noter que sous la dénommination de « breakup length » se cache l'une ou l'autre de ces grandeurs.

En régime instationnaire, la notion de longueur de pénétration est introduite. Elle se définit comme la distance maximale entre le nez de l'injecteur et le front liquide (Figure II.3). Pour les sprays à haute pression, cette distance est bien souvent approximative car il convient de fixer un critère de sélection des particules liquides. Lambert [48] considère, par exemple, la pénétration comme la distance sur l'axe de symétrie du jet entre l'orifice d'injection et la particule liquide qui précède 95% de l'ensemble des fragments liquides.

Afin de caractériser les jets coniques creux, on définit également **l'angle du spray**. Il s'agit de l'angle du plus petit cône contenant tous les fragments liquides représentatifs du spray (frontières de la nappe liquide). Cette grandeur est loin d'être triviale pour ce type de jets, car sa valeur pilote souvent la pénétration du spray : plus l'angle du jet sera grand et plus la pénétration du liquide sera faible.



FIG. II.3 : Longueur de pénétration et angle d'un spray conique creux [91]

Enfin, il est intéressant de connaître la répartition de la taille des gouttes. Cette dernière est étudiée à l'aide d'outils statistiques permettant le calcul de la fonction de distribution de taille définie en nombre  $f_N(D)$ , en volume  $f_Q(D)$  ou en terme de surface.

Les définitions sont les suivantes :

$$\frac{dN}{N_{total}} = f_N(D) \ dD \tag{II.1}$$

$$\frac{dQ}{Q_{total}} = f_Q(D) \ dD \tag{II.2}$$

Où dN et dQ sont respectivement le nombre de gouttes et le volume contenus dans une tranche dD. Ces deux fonctions ne sont pas indépendantes et sont reliées ainsi :

$$f_N(D) = \frac{1}{N_{total}} \frac{dN}{dD} = \frac{1}{N_{total}} \frac{dN}{dQ} \frac{dQ}{dD} = \frac{Q_{total}}{N_{total}} \frac{dN}{dQ} f_Q(D)$$
(II.3)

En pratique, il est impossible d'accéder directement à ces fonctions ; seules des approximations de celles-ci sont utilisées. Des histogrammes représentant le nombre de gouttes ou le volume pour une tranche d'épaisseur d D sont obtenus expérimentalement. Différentes fonctions de distribution sont utilisées pour analyser les jets, les plus courantes sont :

- loi normale :

$$f_N(D) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \left(D - \overline{D}\right)^2\right)$$
(II.4)

- loi log-normale :

$$f_N(D) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} D \sigma} exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \left(\ln D - \overline{\ln D}\right)^2\right)$$
(II.5)

- lois de distributions expérimentales (distribution de Nukiyama-Tanasawa) :

$$f_N(D) = a D^p \exp\left(-b D\right)^q \tag{II.6}$$

Dans la plupart des cas, la distribution des tailles de goutte peut être décrite de façon suffisante comme une fonction de deux paramètres : un diamètre représentatif et une fourchette de tailles. On peut choisir plusieurs diamètres représentatifs :

- $-\ D_{0.1}$  est le diamètre tel que 10% du volume total liquide est contenu dans des gouttes de diamètres inférieurs.
- $D_{0.5}$  est le MMD (Mass Median Diameter) tel que 50% de la masse totale liquide est contenu dans des gouttes de diamètres inférieurs.
- $D_{0.632}$
- $D_{0.9}$

A partir des fonctions de distribution, des paramètres plus globaux comme les rayons moyens peuvent également être définis. La plupart du temps, on utilise une moyenne du type :

$$D_{a,b}^{a-b} = \frac{\int_{D_{min}}^{D_{max}} D^a f_N(D) \ d D}{\int_{D_{min}}^{D_{max}} D^b f_N(D) \ d D}$$
(II.7)

Parmi les diamètres les plus souvent utilisés, se trouvent :

- $-D_{1,0}$  est le diamètre moyen en longueur.
- $-D_{2,0}$  est le diamètre moyen en surface.
- $D_{3,0}$  est le diamètre moyen en volume.
- $D_{3,1}$  est le diamètre moyen volume-longueur.
- $-D_{3,2}$  est le **diamètre moyen de Sauter**, aussi appelé SMD (Sauter Mean Diameter), qui représente en fait une valeur moyenne du diamètre en faisant le rapport de l'intégrale du volume des gouttes sur l'intégrale de leur surface.

Le rapport MMD/SMD est un bon indicateur de la dispersion de taille de goutte. On peut aussi exprimer l'étendue des tailles de gouttes dans un spray par :

$$\Delta = \frac{D_{0.9} - D_{0.1}}{D_{0.5}} \tag{II.8}$$

# II.1.2 Régimes de fractionnement des jets ronds

Comme il a été dit, les régimes de pulvérisation d'un jet rond sont bien connus.

Selon Reitz [74], le fractionnement d'un jet liquide injecté dans un gaz est fonction de sa vitesse d'injection. Les différents régimes peuvent être représentés en traçant la longueur de surface intacte  $(L_{su})$  en fonction de la vitesse (Figure II.4), le graphe correspondant est appelé courbe de stabilité :



FIG. II.4 : Courbe de stabilité [74]

Une très faible vitesse d'injection conduit à la formation de gouttes à la sortie immédiate de l'injecteur, ce régime est communément nommé régime de goutte à goutte (points A, B et C sur la Figure II.4). Au fur et à mesure que la vitesse d'injection croît, Reitz a pu identifier quatre régimes de fractionnement :

 régime de Rayleigh : pour de faibles vitesses d'injection, le fractionnement a lieu à une très grande distance du nez de l'injecteur et des gouttes de diamètre supérieur à celui de la buse apparaissent (Figure II.5).



FIG. II.5 : Régime de Rayleigh (C à D) [30]

- premier régime induit par l'aérodynamique ou « First wind-induced breakup » : lorsque la vitesse d'injection est plus forte, le fractionnement du jet se produit à une distance plus faible, mais suffisamment grande par rapport au diamètre d'injection, et les gouttelettes produites ont un diamètre voisin de celui de la buse (Figure II.6).



FIG. II.6 : Régime de « First wind-induced breakup » (E à F) [30]

- second régime induit par l'aérodynamique ou « Second wind-induced breakup » : le fractionnement est observé à une distance très faible, de l'ordre de quelques diamètres d'injection, et les gouttelettes sont de taille inférieure à l'orifice de l'injecteur (Figure II.7).



FIG. II.7 : Régime de « Second wind-induced breakup » (F à H ou F à G) [30]

régime d'atomisation : à forte vitesse d'injection (nombre de Reynolds supérieur à 3000, d'après Mansour et Chigier [57]), le jet se fractionne très près de la sortie de la buse et les gouttes formées sont très fines (Figure II.8).



FIG. II.8 : Régime d'atomisation (au-delà de H ou G) [30]

En ce qui concerne le régime de Rayleigh, la rupture du jet est due à la croissance d'une oscillation sinusoïdale le long de sa surface. Pour le régime de « First wind-induced breakup », l'accroissement de l'onde sinusoïdale est couplé au mouvement relatif du gaz par rapport au liquide, ce qui crée une distribution de pression à la surface du jet conduisant à une accélération du processus de désintrégation. Pour ces deux premiers régimes, les longueurs de surface intacte et de coeur liquide coïncident. Dans le régime de « Second wind-induced breakup », le fractionnement du jet est toujours induit par les forces aérodynamiques mais un effet supplémentaire d'arrachement des fragments liquides à la surface du jet est introduit. La fragmentation est provoquée par le développement d'ondes superficielles de courtes longueurs d'ondes générées par le mouvement relatif liquide/gaz. Enfin, le régime d'atomisation est caractérisé par une longueur de surface intacte nulle.

Cependant, si la vitesse d'injection joue un rôle primordial dans le fractionnement d'un jet liquide d'autres paramètres, comme la viscosité  $\mu_l$ , la tension superficielle  $\sigma$  du liquide ou encore les masses volumiques du gaz  $\rho_g$  et du liquide  $\rho_l$ , entrent également en jeu. Afin de prendre en compte ces effets, Faeth [30] propose, sur la Figure II.9, un classement des régimes de fractionnement en fonction des nombres sans dimension de Weber du gaz  $We_g$ et d'Ohnesorge *Oh*. Ces nombres traduisent respectivement le rapport entre les forces aérodynamiques et la tension de surface, et le rapport des termes dus à l'inertie sur ceux liés aux forces visqueuses. Ils se définissent ainsi :

$$We_g = \frac{\rho_g \, u^2 \, d}{\sigma} \tag{II.9}$$

Et

$$Oh = \frac{We_l^{0,5}}{Re_l} = \frac{\mu_l}{\sqrt{\sigma \rho_l d}} \tag{II.10}$$

où d est la taille caractéristique du jet (typiquement le diamètre).



FIG. II.9 : Régime de fractionnement en fonction de  $We_g$  [30]

Reitz [74], quant à lui, suggère une représentation, sur la Figure II.10, faisant intervenir le rapport des masses volumiques des deux fluides ainsi que les nombres de Reynolds  $Re_l$ et d'Ohnesorge Oh du liquide.



FIG. II.10 : Limites qualitatives des régimes de fractionnement [74]

Toutefois, il faut noter que les différentes terminologies et classifications utilisées jusqu'ici ne tiennent pas compte de la perturbation initiale (due entre autres à la géométrie interne de l'injecteur) sur le comportement du jet.

# II.1.3 Régimes de fractionnement des jets coniques creux

Les régimes de fragmentation des jets coniques creux ou des nappes liquides sont encore mal identifiés. Néanmoins, Ballester et Dopazo [9] ont mis en évidence expérimentalement six différents régimes d'écoulement suivant la pression d'injection :

- à très faibles pressions d'injection ( $\Delta P < 5 \ bars = 5.10^5 \ Pa$ ), le liquide se comporte comme un jet rond et la vitesse possède une composante tangentielle quasiment nulle en sortie de buse.
- lorsque la pression d'injection augmente ( $\Delta P = 5 \, bars$ ), la composante tangentielle de la vitesse devient non négligeable. Le jet se présente sous la forme d'une nappe qui oscille comme un ruban. Plus en aval, sont observées des accumulations de liquides sur les bords de la nappe dues aux forces de tension superficielle. Des oscillations apparaissent au niveau de ces bourrelets liquides et finissent par désintégrer le jet. Ce régime est très proche de celui de Rayleigh pour les jets ronds.
- pour une pression d'injection correspondant à  $\Delta P = 8 \text{ bars}$ , la nappe liquide s'élargit. En aval du jet, ils visualisent et distinguent deux sortes de perturbations; les bords épais du jet commencent à osciller puis se brisent. Simultanément, ils observent que la nappe liquide relie les bords épais et se met aussi à osciller et à se fragmenter en filaments.
- pour un différentiel de ΔP = 15.5 bars, la composante tangentielle de l'écoulement est importante et crée un fort gradient radial de pression qui se traduit par la formation d'une zone de recirculation d'air au centre du jet, qualifiée de « air core ». C'est seulement à partir de ce seuil de pression qu'un jet conique creux est observé. Ce dernier se développe jusquà un certain stade puis se refeme en raison des forces interfaciales, on parle alors régime oignon ou bulle.

- avec un différentiel de  $\Delta P = 16.5 \, bars$ , la vitesse de la nappe liquide croît considérablement du fait de la diminution de l'épaisseur de la nappe et de l'augmentation du débit. Pour ce régime, l'angle du jet est plus grand. La nappe liquide se brise avant même que le jet ne converge. Il s'agit du régime tulipe. On observe là encore des ondes sinusoïdales à la surface du jet qui s'accroissent jusqu'à ce que survienne la rupture de la nappe en ligaments qui se brisent ensuite eux-mêmes en gouttelettes.
- enfin, quand le différentiel de pression excède 20 bars, le jet conique creux se fractionne dès la sortie de la buse. Des filaments liquides sont également observés, mais la taille des gouttes en aval est très nettement inférieure à celle notée dans le cas précédent. Ce n'est autre que le régime d'atomisation.

Par contre, Cousin, Ren et Nally [19], ont eux défini cinq régimes de fragmentation (voir Figure II.11). Les régimes (c), (d) et (e) sont identiques à ceux identifiés par Ballester et Dopazo, en revanche, pour de faibles vitesses d'injection, ils distinguent un régime de goutte à goutte et un régime de type jet rond.



FIG. II.11 : Les différents régimes d'écoulement pour un jet creux [19]

# II.1.4 Paramètres influençant l'atomisation

Malgré l'importance de l'atomisation dans les applications, les mécanismes responsables de ce phénomène ne sont pas encore bien identifiés. De nombreux auteurs ont essayé d'identifier le processus moteur de l'atomisation. Ainsi, dans un premier temps, Castleman [16] postule que ce phénomène est dû à l'interaction entre le liquide et le gaz (effets aérodynamiques). Dejuhaszz [18], quant à lui, estime que la turbulence du liquide joue un rôle prépondérant dans le fractionnement du jet. Selon lui, l'atomisation débute au sein même de l'injecteur au travers de la création d'une composante radiale de vitesse générant des contraintes importantes. Pour Schweitzer [88], le rôle de la turbulence est de perturber l'interface liquide/gaz et de ce fait d'augmenter les effets aérodynamiques. Dans le cas d'un écoulement laminaire, la vitesse présente un profil parabolique sur l'axe de l'écoulement et une vitesse nulle sur la couche externe. En sortie de buse, existe une très légère différence de vitesse entre l'air ambiant et la couche extérieure du jet liquide. Par conséquent, les forces aérodynamiques sont faibles, ce qui se traduit par une longueur de surface intacte relativement grande. Cependant, au-delà d'une certaine distance, les effets combinés des forces de tension superficielle et de cisaillement générent des perturbations à la surface du jet aboutissant finalement à sa fragmentation. Dans une configuration pleinement turbulente, le jet se fractionne à cause de la composante radiale de vitesse. Schweitzer indique qu'un jet turbulent injecté dans le vide peut se désintégrer sous l'effet de sa seule turbulence. Il conclut également en soulignant que le temps nécessaire à l'air ambiant pour perturber la surface externe du jet dépend de la nature de l'écoulement à la sortie de la buse. Il faut cependant noter que le rapport entre la longueur du tube d'injection et son diamètre conditionne l'établissement partiel ou total de la turbulence le long de la conduite.

Il existe des effets supplémentaires pour tenter d'expliquer l'atomisation. Rupe [81], entre autres, a observé qu'un jet laminaire à grande vitesse pouvait être davantage instable qu'un jet turbulent. Il soupçonne le réarrangement du profil de vitesse d'être responsable de l'atomisation. Dès que le jet quitte l'injecteur et se libère, par conséquent, des contraintes pariétales, a lieu un réarrangement du profil de vitesse avec transfert de quantité de mouvement des couches transversales du spray. De cette façon, le profil de vitesse jusqu'ici parabolique de l'écoulement s'aplatit et présente une vitesse moyenne identique. Il donne ainsi naissance à une composante radiale de vitesse. Cette modification du profil, accompagnée d'une redistribution de l'énergie, est qualifiée de relaxation du profil de vitesse et contribue de manière significative au développement des perturbations sur la surface externe du jet. Les ligaments formés se fractionnent, en effet, sous l'action des instabilités aérodynamiques.

Si l'on se fie aux hypothèses développées précédemment, il semble que l'action de l'air ambiant soit la raison primaire de la fragmentation bien que la turbulence du jet et la présence de couches limites (laminaires ou turbulentes) dans le liquide constituent également des facteurs déterminants. Ces paramètres confèrent au jet une surface fortement irrégulière ce qui le rend plus sensible à l'action de l'air ambiant et, par conséquent, facilitent son fractionnement en présence de forces aérodynamiques faibles. Bergwerk et Sadek supposent, quant à eux, la cavitation à l'intérieur de l'injecteur comme étant la cause principale de l'atomisation. Ce dernier point ne sera pas développé davantage car, par la suite, il sera à nouveau abordé au travers de la présentation des différents modèles d'atomisation.

Enfin, les oscillations de pression du support liquide selon Giffen et Muraszew ont un effet sur l'issue du processus d'atomisation. Puisque ces oscillations de pression d'alimentation sont souvent rencontrées dans les systèmes d'injection, ils suggérent qu'elles jouent un rôle essentiel dans le mécanisme d'atomisation lui-même.

Reitz et Bracco ont réalisé une évaluation des différentes hypothèses émises ci-dessus et de leur étude, il ressort que dans la majorité des cas, le processus d'atomisation résulte des effets d'interaction aérodynamique, de la turbulence du liquide, des effets de réarrangement du profil de vitesse du jet, des phénomènes de cavitation, et des oscillations de pression de l'alimentation liquide. Cependant, aucun des mécanismes précédents ne peut expliquer à lui seul l'atomisation. C'est plutôt une combinaison de ces divers facteurs qui contribue au processus de fragmentation aérodynamique.

En résumé, la structure réelle du jet ainsi que les processus qui conduisent à son atomisation ne sont pas encore réellement connus. La variété des modèles rencontrés dans la littérature témoigne de cet état de fait. On précise que, par la suite, dans les modèles d'atomisation, on appellera goutte mère la goutte avant « breakup »et les gouttes filles les gouttes issues de la goutte mère après le « breakup ».

# II.2 Modélisation de l'atomisation des jets

# II.2.1 Modèles Lagrangiens

La plupart du temps, les modèles d'atomisation des jets liquides implantés dans les codes industriels actuels, comme par exemple KIVA, sont essentiellement de type Lagrangien. Dans ce type de modèle, le liquide n'est pas considéré comme un jet continu en sortie de buse, mais se présente déjà sous forme de gouttes qui vont ensuite se fractionner au contact de l'air ambiant. Ces approches dans lesquelles la phase liquide est toujours représentée par un ensemble de gouttelettes sont particulièrement appropriées pour décrire la fragmentation secondaire. En revanche, elles ne sont pas satisfaisantes dans les milieux denses; leur extension au cas de la fragmentation primaire pose problème. Cette nouvelle section sera consacrée à la description succincte des différents modèles d'atomisation existants.

### II.2.1.1 Modèle de Reitz-Diwakar

Ce modèle [77] est basé sur les travaux de Nicholls [67] qui s'est intéressé à la fragmentation d'une goutte dans un écoulement de gaz à grande vitesse, suivant une onde de choc. Cette étude a permis d'identifier deux régimes de fractionnement :

l'atomisation en sac ou « bag breakup » : la goutte s'aplatit, puis sa partie centrale se gonfle vers l'aval de l'écoulement, et forme un sac creux entouré d'un bord épais. Ce sac se brise ensuite en de nombreux petits fragments. Le bord se désintègre à son tour, entraînant la formation de gouttes plus grosses (Figure II.12).



FIG. II.12 : Régime d'atomisation en sac [73]

Ce régime est observé lorsque :

$$We_g = \frac{\rho_g U^2 r_0}{\sigma} > We_c = 6 \tag{II.11}$$

Où  $We_g$  représente le nombre de Weber du gaz,  $We_c$  un nombre de Weber critiqe,  $r_0$  le rayon de la goutte,  $\rho_g$  la masse volumique du gaz,  $\sigma$  la tension de surface, et U la vitesse relative liquide/gaz.

Le temps de rupture  $t_{bb}$  (ou durée de vie d'une goutte instable) associé à ce processus est donné par :

$$t_{bb} = C_{bb} \sqrt{\frac{\rho_l r_0^3}{\sigma}}; \ C_{bb} = \frac{\pi}{\sqrt{2}}$$

Où  $\rho_l$  représente la masse volumique du liquide.

- l'atomisation par arrachement ou « stripping breakup » : dans ce régime, contrairement au précédent, il n'y a ni formation de sac, ni formation de bord, mais création de lames liquides à la périphérie de la goutte déformée et cisaillée. Dans cette configuration, la goutte est épluchée sur son contour par l'écoulement. On observe alors une diminution progressive de la taille de la goutte mère et la formation de gouttes filles de rayon bien inférieur (Figure II.13).



FIG. II.13 : Régime d'atomisation par arrachement [73]

Ce type de fractionnement a lieu quand :

$$\frac{We_g}{\sqrt{Re_g}} = \frac{\sqrt{\rho_g^2 U^3 r_0 v_g}}{\sqrt{2} \sigma} > \frac{1}{2} \tag{II.12}$$

Avec  $v_g$  le coefficient de viscosité cinématique du gaz et  $Re_g = \frac{U r_0 2}{v_g}$  le nombre de Reynolds du gaz. Le temps de rupture correspondant vaut :

$$t_{sb} = C_{sb} \, \frac{r_0}{U} \, \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \tag{II.13}$$

Dans le modèle, les deux critères (II.12) et (II.13) sont testés sur chaque particule. Il suffit que l'un d'eux soit vérifié pendant une durée égale au temps de rupture pour que la goutte se fractionne. Le rayon de la nouvelle goutte formée est obtenu en transformant l'une ou l'autre des inégalités (II.11) ou (II.12), suivant le cas, en égalité.

Selon O'Rourke et Amsden [69], le second critère est contestable car il sous-entend que l'arrachement des gouttes est lié à la viscosité du gaz alors que les temps de rupure déterminés expérimentalement ne dépendent pas de celle-ci. Par ailleurs, les valeurs des constantes  $C_{bb}$  et  $C_{sb}$  ne sont pas bien déterminées : elles varient suivant les auteurs, par exemple,  $C_{sb} = 20$  pour Reitz et Diwakar, et 8 pour Nicholls.

Reitz et Diwakar [78] ont ensuite apporté des améliorations à leur modèle initial, en supposant une variation continue du rayon des gouttes dans le temps pour l'atomisation par arrachement, suivant la loi :

$$\frac{dr_0}{dt} = -\frac{r_0 - r_{stable}}{t_{sb}} \tag{II.14}$$

Où le rayon stable  $r_{stable}$  a pour expression :  $r_{stable} = \frac{\sigma^2}{2 \rho_g^2 U^3 v_g}$ .

L'angle du spray est modélisé en introduisant une déviation de la trajectoire des gouttes de la manière suivante :

$$\tan\frac{\theta}{2} = C_{\theta} \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \tag{II.15}$$

Avec la constante  $C_{\theta}$ , qui dépend des caractéristiques géométriques de l'injecteur et des propriétés physiques du liquide, généralement fixée à 0.7.

Les critères de stabilité et les corrélations empiriques intervenant dans ce modèle ont été établis à partir des données expérimentales relatives à la désintégration d'une goutte. Les principales limitations de cette approche proviennent du fait que la discrétisation initiale des jets, près du nez de l'injecteur, est réalisée arbitrairement et que contrairement à l'hypothèse de base, une goutte sera forcément affectée par le fractionnement d'une particule voisine dans la région dense du spray.

#### II.2.1.2 Modèle T.A.B.

Le modèle T.A.B. (« Taylor Analogy Breakup ») a été proposé par O'Rourke et Amsden [69]. Il est basé sur une analogie, suggérée par Taylor [93], entre l'oscillation d'une goutte et l'oscillation d'un système {Masse + Ressort} amorti de masse m. La tension de surface est assimilée à la force de rappel du ressort (raideur k); la force externe F est analogue aux forces aérodynamiques, et l'amortissement b aux efforts visqueux. L'équation d'un oscillatour harmonique forcé et amorti est :

L'équation d'un oscillateur harmonique forcé et amorti est :

$$\frac{d^2 x}{d t^2} = \frac{F}{m} - \frac{k}{m} x - \frac{d}{m} \frac{d x}{d t}$$
(II.16)

Soit x le déplacement de l'équateur de la gouttelette (de rayon  $r_0$ ) de sa position d'équilibre (voir Figure II.14).



FIG. II.14 : Oscillation d'une goutte autour de sa position d'équilibre [69]

En accord avec l'analogie de Taylor, les coefficients sont les suivants :

$$\frac{F}{m} = C_F \, \frac{\rho_g \, U^2}{\rho_l \, r_0}, \ \frac{k}{m} = C_k \, \frac{\sigma}{\rho_l \, r_0^3}, \ \frac{b}{m} = C_b \, \frac{\mu_l}{\rho_l \, r_0^2} \tag{II.17}$$

En posant  $q = 2 x/r_0$ , l'équation (II.16) s'écrit :

$$\frac{d^2 q}{d t^2} = C_F \, \frac{2 \,\rho_g \, U^2}{\rho_l \, r_0^2} - \frac{C_k \,\sigma}{\rho_l \, r_0^3} \, q - \frac{C_b \,\mu_l}{\rho_l \, r_0^2} \, \frac{d \,q}{d \,t} \tag{II.18}$$

Où  $\mu_l$  est le coefficient de viscosité dynamique du liquide,  $\sigma$  la tension de surface,  $\rho_l$  et  $\rho_g$  les masses volumiques respectives du liquide et du gaz, U la vitesse relative entre la goutte liquide et le gaz, enfin  $C_F = 1/3$ ,  $C_k = 8$  et  $C_b = 10$  sont des coefficients empiriques introduits pour caler les résultats avec les mesures expérimentales.

Le fractionnement a lieu si et seulement si le déplacement de l'équateur de la goutte est supérieur à  $r_0/2$ , ce qui correspond à q > 1.

Deux temps de rupture sont dégagés : l'un pour le régime d'atomisation en sac, correspondant aux faibles nombres de Weber et l'autre pour le régime d'atomisation par arrachement c'est à dire les forts Weber :

$$t_{b,bag} = \pi \sqrt{\frac{\rho_l \, r_0^3}{8 \, \sigma}} \tag{II.19}$$

$$t_{b,stripping} = \sqrt{3} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \frac{r_0}{U}$$
(II.20)

Dans ce modèle, l'angle du spray n'est pas imposé et l'injection des paquets de gouttes (ou « blobs ») est purement axiale. Pour prédire cet angle et la vitesse de la goutte fille, l'hypothèse suivante est faite : lors de la fragmentation, l'équateur de la goutte se déplace vers l'extérieur avec une vitesse  $\frac{dx}{dt} = \frac{1}{2} r_0 \frac{dq}{dt}$ . Il s'ensuit que les gouttes filles, issues du fractionnement de la goutte mère, possèdent une vitesse normale égale à :

$$V_{\perp} = \frac{C_v}{2} r_1 \frac{d q}{d t} \tag{II.21}$$

Où  $r_1$  désigne le rayon des gouttes filles stables obtenues après fractionnement et  $C_v \approx 1$ . L'angle du spray est calculé à partir de l'expression suivante :

$$\tan\frac{\theta}{2} = C_v \,\frac{\sqrt{3}}{3} \,\sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \tag{II.22}$$

Il faut noter que, dans cette équation (II.22), les effets de la géométrie de l'injecteur ne sont pas pris en compte. Cependant, il est possible de les inclure dans le calcul et de faire varier l'angle initial en donnant une oscillation aux grosses gouttes mères injectées.

Afin de déterminer le nouveau rayon des gouttes formées, on s'appuie sur la conservation d'énergie : l'énergie oscillante de la goutte mère, de rayon  $r_0$ , avant rupture, est transformée en énergie superficielle et cinétique des gouttes filles, de rayon moyen de Sauter  $r_{32}$ , ce qui conduit finalement à l'équation suivante :

$$\frac{r_0}{r_{32}} = 1 + \frac{8K}{20} + \frac{\rho_l r_0^3}{\sigma} \dot{q}^2 \left(\frac{6K-5}{120}\right)$$
(II.23)

Où K = 10/3 et  $r_{32}$  est une donnée du modèle; il est calculé comme étant le rapport du volume sur la surface de toutes les gouttes injectées. La taille des gouttes filles est déterminée par un tirage au hasard dans une distribution de type  $\chi^2$ .

Bien que ce modèle traite principalement le fractionnement secondaire des gouttes, il a souvent été utilisé pour l'atomisation primaire des jets.

## II.2.1.3 Modèle Wave

Reitz [75], dans ce modèle, se positionne avec une approche différente. Il considère que le fractionnement d'une colonne de liquide injectée dans un gaz est induit par la vitesse relative entre les phases liquide et gazeuse. Dans ce cas, l'atomisation est causée par le développement d'instabilités de type Kelvin-Helmholtz, c'est pouquoi ce modèle est aussi appelé modèle KH. La colonne liquide est discrétisée numériquement par des particules liquides, dites « blobs »de diamètre égal à celui de l'orifice d'injection. Dans cette approche, le fractionnement (« breakup ») et la taille des gouttes qui en résultent sont liés à l'onde la plus amplifiée fournie d'après la théorie linéaire des instabilités.

L'analyse de stabilité linéaire (voir Figure II.15), présentée de manière détaillée par Reitz et Bracco [76] permet d'obtenir la longueur d'onde la plus instable  $\Lambda$  et son taux de croissance  $\Omega$ :

$$\begin{cases} \frac{\Lambda}{r_0} = 9.02 \, \frac{\left(1 + 0.45 \, Oh^{0.5}\right) \left(1 + 0.4 \, Ta^{0.7}\right)}{\left(1 + 0.87 \, We_g^{1.67}\right)^{0.6}} \\ \Omega \, \left(\frac{\rho_l \, r_0^3}{\sigma}\right)^{0.5} = \frac{0.34 + 0.38 \, We_g^{1.5}}{\left(1 + Oh\right) \left(1 + 1.4 \, Ta^{0.6}\right)} \end{cases} \tag{II.24}$$

Où  $r_0$  est le rayon de la goutte mère,  $We_g = \frac{\rho_g U^2 r_0}{\sigma}$  le nombre de Weber du gaz, Oh le nombre d'Ohneshorge du liquide qui exprime le rapport de la force de viscosité interne de la goutte sur la force de tension superficielle, et enfin,  $Ta = Oh We_g^{0.5}$  le nombre de Taylor. Reitz utilise ces résultats pour déterminer le rayon r des nouvelles gouttes issues du fractionnement ou gouttes filles :

$$r = \begin{cases} B_0 \Lambda & \text{si } B_0 \Lambda \leq r \\ min \begin{cases} \left(\frac{3 \pi r_0^2 U}{2\Omega}\right)^{0.33} \\ \left(\frac{3 r_0^2 \Lambda}{4}\right)^{0.33} \end{cases} & \text{si } B_0 \Lambda > r \text{ (une scule fois)} \end{cases}$$
(II.25)

Avec  $B_0$  une constante prise égale à 0.61. On suppose que le rayon des gouttes créées est proportionnel à la longueur de l'onde la plus instable. La deuxième partie de l'expression ci-dessus (qui fait intervenir les minima) s'applique uniquement à des gouttes plus grandes que le jet et repose sur l'hypothèse que la perturbation a une fréquence de  $\Omega/2 \pi$  (une goutte est créée à chaque période). Ce cas particulier est vérifié pour le régime de Rayleigh.



**FIG. II.15 :** Représentation schématique des ondes se formant à la surface du jet, donnant naissance à des gouttes [75]

Le temps de rupture s'exprime ainsi :

$$t_w = 3.726 B_1 \frac{r_0}{\Lambda \Omega} \tag{II.26}$$

Où la constante  $B_1$  dépend de la géométrie de l'injecteur et est fixée à 10 par Reitz. La taille de la goutte mère décroît pendant le temps  $t_w$  comme suit :

$$\frac{dr_0}{dt} = -\frac{r_0 - r}{t_w}, r \ll r_0$$
(II.27)

On peut remarquer que la diminution du rayon r est continue dans le temps, à la différence du modèle T.A.B.. Ceci est illustré sur la Figure II.16 ci-dessous.



FIG. II.16 : Désintégration continue de la goutte mère pendant le temps de rupture avec le modèle Wave [75]

Enfin, l'angle du spray est donné par :

$$\tan\frac{\theta}{2} = A_1 \Lambda \frac{\Omega}{U} \tag{II.28}$$

Où  $A_1$  est une constante fonction de la conception de l'injecteur, prise égale à 0.188.

Et une composante de vitesse radiale  $V_0 = U \tan\left(\frac{\theta}{2}\right)$  uniformément distribuée entre 0 et  $\theta$  est affectée aux gouttes filles.

### II.2.1.4 Modèle de Huh et Gosman

Dans ce modèle, Huh et Gosman [39] considèrent que la turbulence du jet et l'inertie du gaz sont les facteurs prépondérants dans le processus d'atomisation. La turbulence du liquide crée une perturbation initiale à la surface du jet en sortie de buse. Les ondes de surface se développent ensuite dans le gaz selon la théorie de Kelvin-Helmholtz, conduisant au final à l'arrachement des gouttes. Le rayon des gouttes mères décroît de la manière suivante :

$$\frac{dr_0}{dt} = -K \frac{L_A}{\tau_A} \tag{II.29}$$

Où la constante K est ajustée pour être en adéquation avec les résultats expérimentaux,  $L_A$  et  $\tau_A$  la longueur et le temps caractéristiques de l'atomisation.

Deux hypothèses principales sont faites :

D'une part,  $L_A$  est égale à deux fois l'échelle intégrale de la turbulence :

$$L_A = 2 L_t \tag{II.30}$$

D'autre part,  $\tau_A$  est une combinaison linéaire des échelles de temps de la turbulence  $\tau_t$  et d'accroissement d'ondes  $\tau_w$ :

$$\tau_A = \tau_t + 1.5 \tau_w \tag{II.31}$$

Les échelles caractéristiques de la turbulence sont déterminées au moyen du modèle  $k-\epsilon$  :

$$\begin{cases} L_t(t) = L_t(0) \left( 1 + 0.92 \frac{t}{\tau_t(0)} \right) \\ \tau_t(t) = \tau_t(0) + 0.92 t \end{cases}$$
(II.32)

où t représente le temps écoulé depuis l'injection de la goutte,  $L_t(0)$  et  $\tau_t(0)$  sont les grandeurs caractéristiques de l'écoulement en sortie de l'injecteur. Ces quantités s'expriment :

$$\begin{cases} L_t(0) = C_{\mu}^{3/4} \frac{k_{inj}^{3/2}}{\epsilon_{inj}} \\ \tau_t(0) = C_{\mu}^{3/4} \frac{k_{inj}}{\epsilon_{inj}} \end{cases}$$
(II.33)

Avec  $C_{\mu}$  la constante du modèle  $k - \epsilon$  valant 0.09;  $k_{inj}$  et  $\epsilon_{inj}$  respectivement l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation dans le nez de l'injecteur définis par :

$$\begin{cases} k_{inj} = \frac{u^2}{8 L_{inj}/D_{inj}} \left( \frac{1}{C_d^2} - 1.45 \right) \\ \epsilon_{inj} = 0.137 \frac{u^3}{L_{inj}} \left( \frac{1}{C_d^2} - 1.45 \right) \end{cases}$$
(II.34)

Où u est la vitesse moyenne du liquide en sortie d'injecteur,  $L_{inj}$  et  $D_{inj}$  sont respectivement la longueur et le diamètre de l'injecteur, et  $C_d$  le coefficient de perte de charge. Ces dernières expressions pourraient être modifiées de manière à tenir compte du phénomène de cavitation au sein de l'injecteur.

Le temps caractéristique d'accroissement d'onde  $\tau_w$  est égal à l'inverse du taux d'accroissement maximum dérivé de la théorie linéaire :

$$\tau_w = \left(\sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \frac{u}{L_w}\right)^{-1} \tag{II.35}$$

Dans cette relation,  $L_w$  est supposée égale à  $4 L_t$ .

L'angle du spray est donné par :

$$\tan\frac{\theta}{2} = \frac{L_A/\tau_A}{u} \tag{II.36}$$

Ce modèle présente l'avantage de prendre en compte la géométrie de l'injecteur et de déterminer son influence sur l'écoulement en aval, mais le nombre considérable de constantes à caler en limite l'aspect prédictif. De plus, les effets instationnaires, tels que la cavitation, ne sont pas considérés dans les conditions aux limites.
# II.2.1.5 Modèle de Pilch et Erdman

Pilch et Erdman [73] proposent un certain nombre de modifications par rapport aux modèles précédents, notamment, avec le modèle de Reitz et Diwakar.

Tout d'abord, ils prennent en compte la viscosité du liquide par le biais du nombre d'Ohnesorge Oh dans l'expression du nombre de weber critique  $We_c$  en dessous duquel aucun fractionnement n'est possible :

$$We_c = 12 \ (1 + 1.077 \ Oh^{1.6})$$
 (II.37)

Où la longueur caractéristique intervenant dans les nombres de Weber et d'Ohnesorge est le diamètre  $d_0 = 2 r_0$  et non plus le rayon  $r_0$ :

$$We_l = \frac{\rho_l \, U^2 \, d}{\sigma}$$

Et

$$Oh = We_l^{0.5} Re_l^{-1} = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \, d \, \sigma}}$$

Lorsque la viscosité est négligée, l'expression est équivalente à celle donnée par le modèle de Reitz et Diwakar (II.11).

De plus, le temps  $t_{pe}$  de rupture s'écrit de la manière suivante :

$$t_{pe} = T_{bu} \frac{2 r_0}{U} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \tag{II.38}$$

Où  $T_{bu}$  est une fonction du nombre de Weber  $We_g$  et non une constante comme pour les modèles précédents :

$$T_{bu} = \begin{cases} 6 \ (We_g - 12)^{-0.25} & \text{si } 12 \le We_g < 18\\ 2.45 \ (We_g - 12)^{0.25} & \text{si } 18 \le We_g < 45\\ 14.1 \ (We_g - 12)^{-0.25} & \text{si } 45 \le We_g < 351\\ 0.766 \ (We_g - 12)^{0.25} & \text{si } 351 \le We_g < 2670\\ 5.5 & \text{si } We_g \ge 2670 \end{cases}$$
(II.39)

en considérant Oh < 1.

Enfin, la variation de vitesse relative  $U_r$  goutte/gaz due au fractionnement est prise en compte dans le calcul du diamètre stable  $d_{st}$  des gouttes après « breakup » :

$$d_{st} = We_c \frac{\sigma}{\rho_g \left(U - U_r\right)^2} \tag{II.40}$$

Mais la détermination de cette vitesse relative  $U_r$  pose des difficultés en ce qui concerne l'implantation de ce modèle. En outre, cette nouvelle approche ne permet pas de résoudre le problème de discrétisation initiale du jet qui ne reflète pas les observations expérimentales.

De nombreux autres modèles sont présents dans la littérature; certains constituent des variantes des approches présentées dans les paragraphes précédents. D'autres sont répertoriés sous l'appellation de modèles hybrides et regroupent deux ou plusieurs modèles de fractionnement qui sont, soit en complémentarité, soit en concurrence. Parmi eux, figurent le modèle de Patterson et Reitz ou encore celui de Habchi *et al.* 

# II.2.1.6 Modèle Wave-FIPA

Habchi *et al* [36] ont réalisé un couplage entre le modèle Wave, décrit précédemment, et un modèle de fragmentation de gouttes FIPA (« Fractionnement Induit Par Acceleration ») mis au point par Lambert [48] et basé sur les corrélations expérimentales de Pilch et Erdman. Dans cette nouvelle approche, les temps de rupture des grands blobs injectés et des gouttes issues de l'atomisation sont calculés de manière différente. Le modèle Wave est utilisé pour le fractionnement des blobs tandis que les corrélations de Pilch donnant les temps de rupture en fonction des nombres de Weber sont considérées pour le calcul du fractionnement des gouttes.

Le modèle Wave offre une bonne précision pour les temps de « breakup »lorsque la vitesse relative gaz/liquide est bien évaluée numériquement, ce qui est difficilement le cas avec les dimensions actuelles des maillages. Pour surmonter cette difficulté, les utilisateurs de Wave corrigent leurs vitesses relatives et donc leurs nombres de Weber en modifiant leurs constantes de temps de rupture. L'idée est, par conséquent, de relier le temps de « breakup »à la densité locale du spray dans le nouveau modèle proposé.

Ce modèle s'appuie sur l'approche de Reitz pour la fragmentation primaire; il utilise l'expression (II.26) pour le temps de rupture $(t_w = 3.726 B_1 \frac{r_0}{\Lambda \Omega})$ .

Pour le fractionnement des gouttes de rayon  $r_0$ , le temps de « breakup » $t_{bu}$  du modèle FIPA est défini comme suit :

$$t_{bu} = C_1 T_{bu} \frac{2 r_0}{U} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}$$
(II.41)

Où  $C_1$  est une constante analogue à  $B_1$  du modèle Wave,  $T_{bu} = f$  ( $We_g$ ) est le temps de rupture donné par le modèle de Pilch et Ederman [73].

Comme dans le modèle Wave, la taille caractéristique de la goutte mère instable qui donne naissance à des gouttes filles plus fines de diamètre d = 2 r, varie continuellement durant le temps de « breakup » :

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r - R_s}{(t_{bu} - t_{bus}) \beta}$$
(II.42)

Dans cette expression,  $\beta$  désigne une constante qui permet d'adapter le comportement du modèle aux résultats expérimentaux et  $t_{bus}$  le temps écoulé depuis le début du fractionnement. La détermination des constantes  $B_1$  et  $C_1$  intervenant dans le calcul des temps de rupture est basée sur le fait que même dans les régions denses du spray, le liquide occupe une part importante du volume mais demeure stucturé en entités discrètes (blobs ou gouttes) dans une phase gazeuse continue. Ces constantes doivent permettre de relier la densité locale du jet au temps de rupture. Pour cela, on considère l'espacement relatif des gouttes (voir Figure II.17) qui correspond à  $\frac{x}{d}$ .



FIG. II.17 : Géométrie d'un groupe de gouttes de diamètre d et d'espacement x [36]

Deux distances relatives critiques de gouttes ont été définies par les auteurs :  $\left(\frac{x}{d}\right)_1 = 3$  et  $\left(\frac{x}{d}\right)_2 = 50$ .

Dans le cas où  $\frac{x}{d} > 50$ , on considère que les gouttes ne sont pas influencées par leurs voisines (gouttes isolées) et la constante  $B_1$  est prise égale à  $B_{12} = 10$  et la constante  $C_1$  à  $C_{12} = 1$ . Si  $\frac{x}{d} < 3$ , le spray est très dense et alors  $B_1$  doit être supérieure à  $B_{12}$ . On choisit  $B_1 = B_{11}$  avec  $B_{11}$  qui est une constante fixée par l'utilisateur, alors que  $C_1$  est fixée égale à  $C_{11} = C_{12} B_{11}/B_{12}$ . Enfin, entre ces valeurs critiques, les constantes  $B_1$  et  $C_1$  sont obtenues par interpolation linéaire. Tout ceci est résumé sur la courbe II.18 ci-dessous :



FIG. II.18 : Valeurs des constantes du modèle Wave-FIPA en fonction de l'espacement relatif des gouttes [36]

# II.2.1.7 Modèle de Patterson-Reitz

Egalement connu sous le nom de modèle KH-RT [72], il est basé sur l'hypothèse que la perturbation du liquide est causée par deux types d'instabilités : la première de type Kelvin-Helmholtz (modèle Wave) et la seconde de type Rayleigh-Taylor. Ces dernières sont mises en compétition et celle qui produira l'onde conduisant à la déstabilisation la plus rapide sera utilisée pour le fractionnement.

#### II.2.1.8 Modèle D.D.B.

Ce modèle appelé D.D.B. pour « Droplet deformation and breakup »suppose que c'est une déformation excessive de la goutte qui est à l'origine du fractionnement. Il s'agit d'une version modifiée du modèle T.A.B. dans laquelle sont pris en compte les effets non linéaires de la déformation de la goutte. L'équation régissant cette déformation s'écrit ainsi :

$$K \frac{d^2 q}{d t^2} + \frac{4 N}{Re_g} \frac{1}{q^2} \frac{d q}{d t} + \frac{27 \pi^2}{16 We_g} q \left(1 - 2 \left(\frac{3 \pi}{4} q\right)^{-6}\right) = \frac{3}{8}$$
(II.43)

De façon analogue au modèle T.A.B., x représente le déplacement de l'équateur de la goutte de rayon  $r_0$  depuis sa position d'équilibre et  $q = \frac{x}{2r_0}$ . Par ailleurs, K corrrespond au rapport des masses volumiques du liquide et du gaz, N à celui des viscosités. Sung Wook Park1 et Chang Sik Lee [71] ont utilisé ce modèle en compétition avec l'approche KH : les blobs injectés sont supposés se désagréger en raison de la concurrence entre les instabilités de type KH et la déformation des gouttes. Cependant, au-delà de la longueur de rupture, l'atomisation s'explique uniquement par la déformation des gouttes et seul le modèle D.D.B. est employé. La théorie sur laquelle repose cette approche hybride est synthétisée sur la figure II.19 ci-dessous :



FIG. II.19 : Concept du modèle de compétition KH-D.D.B. [71]

La longueur de fractionnement  $L_{rupt}$  est calculée avec la relation :

$$L_{rupt} = 0.5 \ D_{inj} \ B_1 \ \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \tag{II.44}$$

Où  $D_{inj}$  désigne le diamètre de l'injecteur et la valeur de la constante  $B_1$  initialement égale à 10 dans le modèle KH a été modifiée afin de se caler avec les mesures.

Afin d'améliorer la modélisation de l'atomisation, certains modèles ont essayé de prendre en compte les effets de la cavitation sur la fragmentation du jet, outre-passant ainsi les limitations des approches comme celles de Huh et Gosman.

# II.2.1.9 Modèle de Gavaises-Arcoumanis

Ce modèle développé par Gavaises et Arcoumanis [5, 32] considère les effets de la cavitation sur la désintégration du jet liquide. D'une part, il fait l'hypothèse que le jet se désagrège suite au « collapse » des bulles de cavitation qui émergent de l'injecteur. D'autre part, les bulles sont supposées interagir avec la turbulence du liquide et par conséquent, sont susceptibles d'éclater à la surface du jet avant la fin de leur collapse. Pour chacun de ces cas, un temps caractéristique est calculé; il s'agit respectivement des temps de collapse  $\tau_{collapse}$  et d'éclatement  $\tau_{burst}$ . Le premier est estimé par le temps de Rayleigh.

Le second représente le temps nécessaire à une bulle de rayon  $r_{cav,eff}$  pour atteindre la périphérie du jet et s'écrit :

$$\tau_{burst} = \frac{r_{hole} - r_{cav,eff}}{u_{turb}} \tag{II.45}$$

Grâce à son modèle de conduite qui décrit l'écoulement dans l'injecteur, Gavaises obtient une expression pour la vitesse d'injection effective  $u_{jet}$  due à la cavitation. Cette grandeur lui permet de déterminer une aire effective de sortie occupée par le liquide  $A_{eff} = \pi r_{eff}^2$ . La différence entre cette aire et l'aire géométrique  $\pi r_{hole}^2$  correspond à la surface occupée par les bulles de cavitation. Un rayon de bulle équivalent est alors défini en faisant l'hypothèse que la bulle se déplace radialement avec une vitesse égale à la fluctuation de vitesse  $u_{turb}$ :

$$r_{cav,eff} = \sqrt{r_{hole}^2 - r_{eff}^2}; \ r_{eff}^2 = \sqrt{\frac{A_{eff}}{\pi}}$$
 (II.46)

De plus, à partir des corrélations donnant l'énergie cinétique turbulente dans l'orifice  $k_{turb}$ , et en supposant la turbulence isotrope, il détermine la fluctuation de vitesse  $u_{turb}$  du liquide :

$$u_{turb} = \sqrt{\frac{2}{3} k_{turb}} \tag{II.47}$$

Le temps caractéristique d'atomisation est ensuite défini comme :

$$\tau_{atom} = \min\left\{\tau_{collapse}, \tau_{burst}\right\} \tag{II.48}$$

Et l'échelle caractéristique de longueur  $L_{atom}$  des perturbations sur la surface du jet ainsi :

$$L_{atom} = 2 \pi r_{cav,eff} \tag{II.49}$$

L'angle de sortie du spray  $\theta$  est calculé comme suit :

$$\tan\frac{\theta}{2} = \frac{L_{atom}/\tau_{atom}}{u_{jet}} \tag{II.50}$$

A partir du temps et de la longueur caractéristiques d'atomisation, il est alors possible d'introduire la force  $F_{total}$  s'exerçant à la surface du jet chaque fois qu'il y a collapse ou éclatement de bulles. La force de tension de surface s'opposant à l'atomisation du jet, un diamètre stable maximum de goutte est calculé en posant  $F_{total} = F_{surf}$ . Afin de déterminer la taille des gouttes, Gavaises émet l'hypothèse que la probabilité de formation d'une goutte est la même, quelle que soit sa taille (de zéro au diamètre stable). La distribution radiale  $\theta_i$  des gouttes de masse  $m_i$  est inversement proportionnelle à leur masse :

$$\theta_i = C_{profil} \frac{\theta_i}{2} \left[ 1 - \frac{m_i}{m_{max}} \right] \tag{II.51}$$

Avec  $m_{max}$  est la masse maximale d'un fragment liquide formé et  $C_{profil}$  un coefficient qui dépend du profil de vitesse en sortie d'injecteur défini comme :

$$C_{profil} = XX \frac{Q(\theta_i)}{Q_{total}} \tag{II.52}$$

Où XX est un nombre pris au hasard entre 0 et 1,  $Q(\theta_i)$  le débit de liquide à l'angle  $\theta_i$ , et  $Q_{total}$  le débit total. Si le profil de vitesse est uniforme, alors  $C_{profil} = XX$ . Ce modèle couplé à un modèle de conduite a été utilisé pour mettre en évidence les différents mécanismes responsables de l'atomisation : la force aérodynamique, la turbulence contenue dans le jet liquide et la force rapportée à la cavitation  $\frac{F_{total}}{A_{eff}}$ . Cette approche prend en compte les effets aérodynamiques, la turbulence du liquide et la cavitation. Les auteurs ont souligné l'importance primordiale des effets de la cavitation sur le processus de désintégration du jet. Le modèle d'atomisation par collapse permet d'approcher les courbes expérimentales de manière satisfaisante, essentiellement dans la zone de mesure proche de l'injecteur, là où les autres modèles donnent des résultats médiocres. Néanmoins, il nécessite la manipulation d'un nombre élevé de constantes empiriques et les résultats effectivement obtenus ne permettent pas réellement d'accéder à une meilleure compréhension du phénomène de « breakup ». Finalement, son originalité réside dans le fait qu'il offre un couplage intéressant entre l'écoulement à l'intérieur de l'injecteur et l'atomisation du liquide.

## II.2.1.10 Modèle C.E.B.

Le principe de ce modèle, nommé C.E.B. pour « Cavitation Bubble Collapse Energy Breakup »[68] est d'inclure le collapse des bulles de cavitation dans le processus de fractionnement. Contrairement à l'approche précédente, cette étude repose sur le principe de conservation de l'énergie. Dans un premier temps, un modèle phénoménologique de cavitation dans les injecteurs permet d'obtenir une distribution de taille de bulles en sortie, en donnant leur rayon moyen de Sauter. Puis, le diamètre de ces gouttes évolue selon la théorie de Rayleigh. Les bulles passant d'un rayon initial  $R_i$  à un rayon final  $R_f$ , l'énergie relative au processus est transmise au liquide et s'exprime de la façon suivante :

$$E_{bu} = \frac{4 \pi P_l}{R_i^3 - R_f^3} \tag{II.53}$$

Où  $P_l$  désigne la pression du liquide (carburant). En intégrant la contribution d'énergie pour toutes les bulles, l'énergie cinétique turbulente s'écrit :

$$k_{bu} = \sum \frac{E_{bu}}{m_l} \tag{II.54}$$

Avec  $m_l$  la masse du liquide. L'énergie turbulente produite par le collapse de la cavitation représente 80% de l'énergie cinétique turbulente totale du fluide. Le reste de cette énergie est calculé au moyen de la relation empirique suivante :

$$k_{flow} = \frac{U_{hole}^2}{8 \left(\frac{L_{hole}}{D_{hole}}\right)} \left(\frac{1}{C_{d_{hole}}^2} - 1.45\right)$$
(II.55)

Où  $L_{hole}$  est la longueur caractéristique du trou de l'injecteur,  $D_{hole}$  son diamètre,  $C_{d_{hole}}$  le coefficient de perte de charge et  $U_{hole}$  la vitesse dans ce trou. En supposant la turbulence isotrope, une expression est obtenue pour la vitesse turbulente de la goutte mère :

$$U_{turb} = \sqrt{\frac{2 \ (k_{flow} + k_{bu})}{3}}$$
(II.56)

Un bilan des forces s'exerçant sur la goutte mère est fait :

$$\begin{cases} F_{aero} = \pi D_{hole} \frac{2}{3} D_{hole} \frac{\rho_g}{2} U_{rel}^2 \\ F_{turb} = \pi D_{hole} \frac{2}{3} D_{hole} \frac{\rho_g}{2} U_{turb}^2 \\ F_{surf} = \pi \sigma D_{hole} \end{cases}$$
(II.57)

Où  $U_{rel}$  est la vitesse relative entre la goutte et le gaz ambiant,  $F_{aero}$  représente les forces aérodynamiques,  $F_{turb}$  la force de turbulence et enfin,  $F_{surf}$  la force de tension de surface. Il faut d'ailleurs noter que la force de tension superficielle se retrouve en compétition avec les deux autres. Quand  $F_{aero} + F_{turb} > F_{surf}$ , le diamètre de la goutte mère diminue jusqu'à atteindre  $F_{aero} + F_{turb} = F_{surf}$ . Il prend alors une nouvelle valeur égale à :

$$D_{new} = 3 \frac{\sigma}{\rho_l \, U_{turb}^2} \tag{II.58}$$

Le surplus de volume est réparti entre les gouttes filles. Le diamètre de chacune de ces gouttes est estimé en utilisant le modèle Wave, en remplaçant  $U_{turb}$  par la vitesse relative entre la goutte mère et le gaz. Ensuite, les gouttes filles sont supposées ne plus contenir de bulles de cavitation et le modèle T.A.B. est utilisé pour traiter le fractionnement secondaire. Le principe général du modèle C.E.B. est résumé sur la figure II.20 suivante :



FIG. II.20 : Philosophie et hypothèses sous-jacentes au modèle C.E.B. [68]

Un des gros atouts de ce modèle est de calculer l'angle du spray, alors que dans la plupart des autres approches, ce dernier est imposé. En revanche, une meilleure connaissance des conditions en sortie de l'injecteur permettrait de ne pas avoir à spécifier les rayons des bulles de cavitation de façon arbitraire.

# II.2.1.11 Conclusion sur les modèles Lagrangiens

L'état de l'art en modélisation montre bien l'historique de la compréhension du phénomène : jusqu'à maintenant, la théorie a expliqué la pulvérisation par l'amplification d'une perturbation initiale de la surface d'un jet liquide cylindrique (pour le modèle Wave) ou encore l'amplification de l'oscillation d'une goutte (pour le modèle TAB), expliquées par les effets aérodynamiques (vitesse relative entre le liquide et le gaz). Les modèles d'atomisation récents comportent l'intégration de phénomènes comme la cavitation, la turbulence, le mélange diphasique à la sortie de l'injecteur mais à un stade pour l'instant très empirique. En effet, la difficulté à disposer expérimentalement des caractéristiques du jet en sortie d'injecteur constitue un frein considérable à la compréhension et la représentation des influences de l'écoulement interne de la buse sur la pulvérisation du jet.

Une des caractéristiques indispensable du modèle d'atomisation doit être sa capacité à décrire le processus dans sa totalité de manière continue pour permettre au milieu extérieur de pouvoir affecter l'atomisation. La difficulté se situe au niveau de la fragmentation primaire qui a lieu juste à la sortie de l'injecteur et qui correspond généralement à un mélange de gaz et de liquide. En raison du grand nombre d'interfaces liquide-gaz présentes, la partie dense du spray est difficile à étudier tant numériquement (nécessité de représenter les caractéristiques interfaciales) qu'expérimentalement (les diagnostics lasers sont souvent faussés par les effets de multi diffusion et de réflexion qui se produisent à l'interface).

Dans les paragraphes précédents, une brève description des méthodes Lagrangiennes et de leurs limitations a permis de souligner que ces méthodes présentent un handicap pour la modélisation de la zone dense des jets localisée près du nez de l'injecteur. Ces approches, si elles ont l'avantage d'être simples, présententent l'inconvénient de ne pas modéliser le processus de fragmentation lui-même, ce qui leur enlève de la généralité. En effet, dans ces modèles, le liquide est assimilé à un ensemble de gouttelettes, même dans le cœur liquide du jet (hypothèse de « blobs »). La fragmentation primaire n'est souvent pas calculée : les blobs initiaux de liquide sont injectés avec des caractéristiques *a priori*, par exemple, dans beaucoup de modèles leur taille est supposée liée au diamètre de l'injecteur. De plus, la plupart du temps, l'angle du spray est imposé. Ces approches semblent donc particulièrement appropriées pour décrire la fragmentation secondaire. En revanche, leur extension au cas de la fragmentation primaire pose problème. D'une manière générale, les résultats fournis avec de tels modèles ne sont pas satisfaisants dans la région située à proximité de l'injecteur.

Il semble donc capital d'apporter des améliorations à la modélisation pour surmonter les limitations des méthodes Lagrangiennes et parvenir à une meilleure représentation de l'atomisation. Afin d'ouvrir de nouvelles perspectives en terme de prédiction des jets liquides, il convient de développer une nouvelle approche pour décrire les écoulements diphasiques dans les pulvérisations de pesticides, qui permettra, notamment, un couplage entre l'atomisation et les effets de la turbulence naissant dans la buse d'injection. Une modélisation Eulérienne paraît la seule capable de répondre à de telles exigences et par conséquent, constitue une voie d'amélioration. Il nous faut donc choisir maintenant parmi ces méthodes de modélisation diphasique celle qui est la plus adaptée à notre problèmatique.

# II.3 Modélisation des écoulements diphasiques

# II.3.1 Introduction

L'approche Lagrangienne est souvent adoptée pour décrire l'écoulement des jets de carburant dans le secteur automobile. Cette modélisation est, en effet, bien adaptée aux écoulements en phase dispersée diluée - présence d'inclusions sphériques à faible fraction volumique dans une phase continue - Cependant, pour des sprays denses (fraction volumique liquide élevée) comme ceux rencontrés en pulvérisation agricole, ces méthodes ne permettent pas de prédire avec précision le comportement de la phase liquide, en particulier dans la zone proche du nez de la buse.

Pour parvenir à une meilleure représentation de l'atomisation en sortie de buse, et pour permettre la prise en compte de l'écoulement à l'intérieur de la buse (effets de la turbulence du liquide, ...), il est nécessaire d'utiliser une modélisation diphasique.

A l'heure actuelle, il n'existe pas de consensus sur la modélisation des écoulements diphasiques. Les nombreuses configurations rencontrées et la complexité des phénomènes à modéliser en sont la principale raison. La modélisation de ces écoulements a fait l'objet de nombreuses études. Il existe toute une hiérarchie de modèles. L'objectif de ce chapitre est de présenter, assez brièvement et de manière non exhaustive, les principales méthodes proposées dans la littérature. Ces approches peuvent être décomposées en deux grandes familles, chacune pouvant ensuite être déclinée de diverses manières. Les « modèles de mélange », qui seront exposés dans un premier temps, assimilent l'écoulement diphasique à un seul fluide avec ses caractéristiques propres. A l'inverse, les « modèles à deux fluides », qui seront décrits ensuite considèrent chacune des phases comme un fluide en écoulement. Lors de la présentation de ces différents modèles, les avantages et les limitations de chaque méthode seront détaillés dans le but de déterminer celle qui semblera la plus adéquate pour traiter du problème de la fragmentation d'un jet liquide lors d'une pulvérisation de pesticides.

# II.3.2 Modèles de mélange

La modélisation des écoulements diphasiques à l'aide d'un modèle de mélange consiste à ne considérer qu'un seul fluide correspondant au mélange des deux phases. Le « pseudofluide » considéré possède une masse volumique qui varie entre celles des deux fluides mis en jeu. Dans ce cas présent, l'interface n'est pas explicitement définie, mais peut être obtenue *a posteriori*. La résolution d'un unique système d'équations est nécessaire : les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont écrites pour ce fluide. La principale difficulté pour ce type de modèle est de parvenir à établir une équation d'état permettant de décrire de manière réaliste (adéquation avec les phénomènes physiques impliqués) le mélange diphasique, autrement dit, disposer d'une équation d'état qui soit à la fois valable pour le liquide pur, pour le gaz pur, mais aussi et surtout, pour le mélange diphasique (à proximité de l'interface). A ce propos, Dumont, Simonin et Habchi [28] ont répertorié les différentes équations d'état disponibles dans la littérature.

Un modèle de mélange spécialement dédié à l'atomisation des jets a été développé par Vallet et Borghi [12, 100, 101]. Il calcule l'écoulement d'un fluide dont la masse volumique est variable; dans les zones purement liquides, la masse volumique est constante et égale à celle du liquide (équation d'état d'un fluide incompressible), alors qu'elle varie lorsque le mélange est diphasique, en fonction de sa composition. Il s'agit d'une modélisation Eulérienne, inspirée de celle des écoulements turbulents à masse volumique variable. Le modèle est basé sur le fait que la fragmentation primaire d'un liquide en régime d'atomisation s'effectue immédiatement en sortie d'injecteur, dans une zone très dense, et qu'un traitement Eulérien à une seule vitesse est par conséquent possible. Une approche moyennée des équations est adoptée. Une nouvelle grandeur physique, la fraction massique liquide Y qui prend la valeur zéro dans le gaz et un dans le liquide est introduite pour permettre de calculer la dispersion du liquide. Une équation de transport moyennée lui est associée. La taille des fragments liquides est accessible à partir d'une nouvelle grandeur  $\Sigma$  qui correspond à la densité d'aire interfaciale dans chaque maille de calcul et qui est également transportée. L'équation de  $\Sigma$ , couplée avec celle de la fraction massique liquide moyenne, conduit à une expression pour la taille moyenne des gouttes formées. Dans ce type de modèle, une attention toute particulière est prêtée à la fermeture des équations. Il faut noter cependant que les effets de la gravité et de l'évaporation du liquide ne sont pas pris en compte. Une synthèse des différentes approches utilisées pour écrire l'équation de transport de  $\Sigma$  a d'ailleurs été réalisée par Morel [65].

D'autres modèles de mélange comme celui de Jay *et al* [42] ont été développés pour représenter le jet produit par un injecteur coaxial. Ils considèrent l'écoulement d'un fluide homogène en modélisant le différentiel de vitesse, et en utilisant également une équation de transport pour la densité d'aire interfaciale. Ces approches présentent l'intérêt de prendre en compte les deux mécanismes de fractionnement d'un jet de carburant, l'atomisation primaire et la fragmentation secondaire (fractionnement en gouttelettes plus fines des gouttes créées). En outre, malgré une approche de type « mélange », il est possible de considérer une vitesse de glissement entre les phases par le biais de la modélisation.

En résumé, le recours à un modèle de mélange pour représenter un écoulement diphasique implique l'hypothèse d'un équilibre cinématique et thermodynamique local entre les phases, ce qui se traduit notamment par une faible vitesse relative entre les phases. De plus, étant donné qu'un unique système d'équations est résolu, seules les grandeurs physiques du mélange sont connues. On ne dispose pas par conséquent des vitesses de chacune des phases. Une autre source de difficulté dans ces modèles est la définition d'une équation d'état adaptée à l'écoulement étudié. L'accès à la taille de gouttes n'est pas immédiat, mais l'introduction d'une équation supplémentaire pour la densité d'aire interfaciale permet de s'affranchir de cet inconvénient. En revanche, un des intérêts majeurs de cette catégorie de modèles réside dans la simplicité des équations à résoudre (absence de termes d'échange) et leur nombre restreint, même dans le contexte d'une approche tridimensionnelle. Ces avantages en font une méthode attrayante pour la modélisation de l'atomisation des jets en sortie des injecteurs. C'est pourquoi, par la suite, nous considèrerons une approche de ce type pour la modélisation de l'écoulement d'un jet de pesticides à partir d'une buse à turbulence. Le modèle retenu sera largement présenté dans le chapitre suivant.

Si la résolution des équations de transport pour un mélange diphasique est commune aux différents modèles, ceux-ci diffèrent par la description de l'interface.

# II.3.2.1 Méthodes à suivi d'interface

Les méthodes à suivi d'interface résolvent les équations de transport du fluide sur un maillage entourant les inclusions (goutte, bulle ou particule) dont on souhaite étudier les déformations. Pour ce type d'approche, il est possible de distinguer deux classes principales :

- les méthodes utilisant un maillage mobile.
- les méthodes utilisant un maillage fixe.

### II.3.2.1.1 Méthodes à maillage mobile

La particularité de ces méthodes est l'utilisation d'un maillage déformable et mobile qui épouse la forme de l'interface. A chaque pas de temps, ce maillage doit être remis à jour. Il est ainsi possible de suivre de manière précise les interfaces et de traiter rigoureusement les conditions de saut et les forces de tension superficielle. Ces méthodes ont été utilisées pour la première fois par Ryskin et Lian [82] et, plus récemment, par Legendre [50] (Figure II.21) pour modéliser la déformation d'une bulle.



FIG. II.21 : Maillage mobile élaboré pour étudier la déformation d'une bulle [50]

Ces techniques présentent l'avantage, en dépit d'un surcoût du temps de calcul, de résoudre exactement les bilans à l'interface. Elles sont parfaitement appropriées lorsque l'on souhaite suivre une inclusion isolée ou une surface libre. Cependant, ces méthodes sont relativement difficiles à mettre en œuvre. Générer des maillages de ce type s'avère très complexe dès lors que l'on a affaire à des phénomènes de rupture ou de recollement d'interfaces (cas de la majorité des écoulements à interfaces déformables). Dans le cas de la représentation de l'atomisation d'un jet liquide dans un milieu gazeux, il est impensable de pouvoir employer ces techniques : les gouttes sont très nombreuses et possèdent des tailles très différentes, ce qui conduirait à un maillage très fin et énorme et deviendrait, par conséquent, problématique, voire insoluble en terme de temps de calcul. Dans ces situations, une alternative consiste à s'orienter vers des méthodes utilisant une grille fixe sur laquelle se déplacent les interfaces.

# II.3.2.1.2 Méthodes à maillage fixe

Avec de telles méthodes, les interfaces peuvent subir de fortes déformations sans que la précision du calcul ne se trouve altérée. De plus, il n'est pas nécessaire d'utiliser d'algorithme de reconnexion ou de rupure d'interface. Par contre, des marqueurs permettant de repérer la position de l'interface doivent être introduits dans le domaine de calcul. Deux grandes familles de méthodes permettent de suivre les interfaces :

– les méthodes de suivi de front.

- les méthodes de suivi en volume.

# Méthodes de suivi de front

Ces méthodes, communément nommées méthodes de suivi de front ou « Front Tracking » permettent de suivre exactement l'évolution de l'interface au cours du temps. Pour cela, des marqueurs sont positionnés dans l'écoulement sur l'interface. Puis, à chaque pas de temps, une équation qui permet de déterminer la nouvelle position des marqueurs est résolue. A ce propos, diverses méthodes permettent de repérer les marqueurs dans l'espace. La plus simple proposée par Unverdi et Tryggvason [98, 99] consiste à définir une fonction h(t, x) représentant la distance du marqueur par rapport à une ligne ou surface de référence, comme cela est schématisé sur la Figure II.22(a).

Grâce à ces méthodes, il est possible de connaître avec précision la courbure et l'orientation de l'interface, et ainsi de réaliser une évaluation précise des contributions visqueuses et capillaires. Par conséquent, elles ont été largement appliquées aux écoulements à surface libre (voir les travaux de Cruchaga, Celentano et Tezduyar [21]) et au suivi de bulles (Kawamura et Kodama [45]). Elles ont notamment été utilisées pour représenter des instabilités de Rayleigh-Taylor par Mulder *et al* [66] et de type Kelvin-Helmholtz par Chen *et al.* Mais, malgré une relative simplicité de mise en œuvre, elles montrent rapidement des limitations. En effet, dans le cas où plusieurs points de l'interface possédent, à un instant donné, la même abscisse, il est nécessaire d'introduire une modélisation paramètrique de l'interface avec une abscisse curviligne s (voir Figure II.22(b)).



(a) avec une fonction distance (b) avec une représentation paramètrique

FIG. II.22 : Méthode de suivi de front [11]

De plus, des difficultés importantes sont rencontrées lorsque l'on est en présence d'interfaces complexes ou multiples. La gestion de la distribution des marqueurs peut se révéler également fort complexe, ce qui limite souvent le domaine d'application de ces méthodes à des écoulements où les interfaces sont peu déformées.

Pour résumer, les principaux avantages des méthodes de suivi de front sont les suivants :

- résolution possible des structures de taille inférieure à la maille (cellule de calcul).
- absence de diffusion numérique au niveau de l'interface.

Et leurs défauts :

- problème de stabilité numérique (apparition d'oscillations) dues aux brusques variations des propriétés physiques du mélange diphasique.
- traitement difficile des ruptures et des reconnexions d'interface.

– gestion difficile de la répartition spatiale des marqueurs.

Des travaux récents menés par Unverdi et Tryggvason [99] ont toutefois permis de s'affranchir de certains des problèmes mentionnés ci-dessus mais la représentation des interfaces fortement déformables n'en demeure pas moins complexe. Ils ont défini le concept de maillage interfacial (Figure II.23). En plus du maillage fixe utilisé pour les grandeurs physiques habituelles, un maillage mobile est associé à l'interface et permet sa description.



FIG. II.23 : Représentation de la notion de maillage interfacial [99]

En conclusion, il n'est pas envisageable d'utiliser ces méthodes pour la modélisation tridimensionnelle de l'atomisation d'un jet liquide au cours de laquelle les interfaces sont susceptibles de subir des changements de topologie fréquents et des étirements.

# Méthodes de suivi en volume

Le principe de base de ces méthodes est de conserver le volume de chacune des phases de l'écoulement, ce qui correspond pour un écoulement incompressible à la conservation de la masse. La plupart du temps, une reconstruction de l'interface n'est pas nécessaire, la connaissance de sa position approximative suffit. Ce type de méthode semble davantage adapté à la modélisation des nuages de gouttes issus de la pulvérisation. Dans ce cas, il n'est pas utile de connaître la position exacte de l'interface mais seulement la concentration volumique de chaque espèce dans chaque maille de calcul.

L'idée est d'introduire des marqueurs dans l'un des fluides. Dans ce cas, l'interface se situe entre une cellule vide et une cellule contenant un marqueur. Connaissant la position des marqueurs, il est ainsi directement possible de savoir dans quelle région se trouve le fluide en question, et par suite de reconstruire l'interface. Parmi ces méthodes figure la méthode MAC (« Marker And Cell ») mise au point par Welch et Harlow [105] pour traiter initialement des problèmes de surface libre et, ensuite, étendue aux écoulements à deux fluide par Daly [22, 23]. Cette dernière ne nécessite plus l'utilisation d'algorithmes complexes de reconstruction ou de rupture d'interfaces. En revanche, il est indispensable de disposer d'un grand nombre de marqueurs (par rapport au nombre de noeuds du maillage) pour modéliser correctement l'interface. Le nombre démesuré de marqueurs requis pour traiter les interfaces complexes génère des problèmes de stockage de données et rend, par conséquent, inenvisageable l'utilisation de cette méthode dans bien des cas. Ce n'est qu'au début des années 80 que Hirt et Nichols [38] proposent de transporter ce qu'ils appellent une « fonction indicatrice » pour l'écoulement. A partir de cette idée fondatrice, il est possible de distinguer deux approches : avec ou sans reconstruction de l'interface.

#### Méthodes avec reconstruction d'interface

Il existe deux types de méthodes de reconstruction de l'interface : les méthodes « Volume Of Fluid »(VOF) et « Level Set »(lignes de niveaux). Les premières, spécialement conçues pour la modélisation d'écoulements diphasiques, sont basées sur le principe de conservation de la masse. Leur particularité est de considérer une fonction caractéristique de phase  $\tau$ , convectée par l'écoulement, qui représente, pour chaque cellule, la fraction volumique occupée par l'un des fluides, appelée aussi taux de présence de phase :

$$\tau = \begin{cases} 0 & \text{dans le fluide 1} \\ 1 & \text{dans le fluide 2} \end{cases}$$

L'idée directrice est de transporter cette fonction indicatrice de phase en résolvant son équation d'évolution (hyperbolique) afin de déterminer sa distribution au cours du temps. A titre d'exemple, une bulle circulaire est représentée avec cette fonction de la manière suivante (Figure II.24) :



FIG. II.24 : Représentation de l'interface avec une fonction indicatrice de phase

Les caractéristiques de l'interface sont déduites du champ de fraction volumique; plusieurs méthodes de reconstruction d'interface peuvent être utilisées parmi lesquelles la reconstruction à l'aide de segments horizontaux ou verticaux, ou la reconstruction affine par morceaux (méthode CIAM, « Calcul d'Interface Affine par Morceaux »). La Figure II.25 ci-dessous représente de façon schématique les résultats obtenus avec chacune de ces méthodes :



(a) Interface réelle et fractions volumiques correspondantes



morceaux

FIG. II.25 : Exemple de reconstruction d'interface [11]

Les méthodes VOF sont largement appliquées, dans la littérature, à l'étude de phénomènes complexes comme le fractionnement et la coalescence (Lafaurie *et al* [47]; Gueyffier *et al* [35]) ou encore la cavitation (Marcer et Le Gouez [60] dans le code EOLE). Récemment, Theodorakakos et Bergeles [95] ont proposé une méthode VOF utilisant un raffinement local automatique du maillage à proximité de l'interface, conduisant à une amélioration de la précision numérique et à une diminution du temps de calcul. Ces méthodes présentent beaucoup d'avantages. Elles assurent une bonne conservation de la masse de chacune des espèces et permettent une description précise de l'interface. Elles sont également robustes lors de changements topologiques, qui s'effectuent de façon implicite.

Cependant, ces méthodes font intervenir des méthodes de reconstruction d'interfaces qui nécessitent l'utilisation d'algorithmes très complexes et coûteux en temps de calcul. Leurs propriétés algébriques sont insuffisantes : pour reconstruire l'interface, on ne dispose, en effet, que de deux informations, à savoir la valeur de la fraction volumique,  $\tau$ , et la valeur de son gradient, $\nabla \tau$ , qui permet de déterminer la normale. De ce fait, la localisation du front est diffuse et rend, par conséquent, difficile et imprécis le calcul des grandeurs le caractérisant (courbure, tangente). Ainsi, des problèmes considérables surviennent lorsqu'existent dans l'écoulement étudié de forts sauts de masse volumique (cas, par exemple, d'une interface eau-air à pression ambiante) et cela même si le maillage est très raffiné. De plus, ces méthodes souffrent d'un autre défaut : elles sont incapables de traiter des structures de taille inférieure à la maille de calcul. Par ailleurs, pour des modélisations tridimensionnelles, le formalisme est très lourd et très complexe à mettre en œuvre, puisqu'il est nécessaire d'effectuer une reconstruction de l'interface à partir du champ de fraction massique. Au début de la thèse, nous avons été tentés d'adopter une telle approche pour représenter notre écoulement, mais aucun des essais réalisés n'a abouti à des résultats concluants, ce qui nous a conduit à abandonner cette démarche de modélisation.

Enfin, la méthode « Level Set » est la méthode de suivi d'interface la plus récente, elle a été développée par Osher et Sethian [70]. Elle est basée sur le même concept que les méthodes de type VOF mais utilise non pas une fraction volumique mais une fonction distance à l'interface  $\Phi$ . Cette fonction, supposée régulière et continue correspond à une fonction dite de distance signée (« Level Set ») et se définit ainsi :

$$\begin{cases} \Phi(x,t) \prec 0 & \text{dans le fluide 1} \\ \Phi(x,t) = 0 & \text{sur l'interface} \\ \Phi(x,t) \succ 0 & \text{dans le fluide 2} \end{cases}$$

c'est à dire, elle est nulle aux points situés sur l'interface, négative dans une phase et positive dans l'autre, sa pente est égale à l'unité.

Cette approche peut cependant être classée dans les méthodes de suivi en volume car l'équation de transport pour la grandeur  $\Phi$  s'écrit sous une forme similaire à celle de la fraction volumique. On suppose, en effet, que l'interface se déplace avec les particules fluides, ce qui permet d'obtenir l'équation suivante :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \cdot \nabla \Phi = 0$$

Par exemple, une bulle circulaire sera repésentée par cette fonction de la façon suivante (Figure II.26) :



FIG. II.26 : Représentation de l'interface avec la fonction Level Set

Comme pour les méthodes précédentes, il est nécessaire de procéder à la reconstruction de l'interface dans les mailles où la fonction  $\Phi$  change de signe. La masse volumique et la viscosité sont supposées constantes dans les deux fluides et prennent des valeurs en fonction du signe de  $\Phi$ .

Une description plus détaillée de cette méthode est fournie dans les articles de Sussman et al [92]. La figure II.27 donne un exemple d'application de cette méthode à un écoulement diphasique.



FIG. II.27 : Jet d'eau formé à partir d'une bulle d'air de diamètre 1 cm (Sussman et Smereka, 1997)

Cette nouvelle approche permet de calculer aisément les caractéristiques géométriques du problème, et prend en compte les changements topologiques de manière naturelle. De plus, sa mise en œuvre est aussi directe en 2D qu'en 3D. Toutefois, comme toute méthode qui transporte une fonction continue pour décrire l'interface, la méthode « Level Set »se heurte à certains problèmes dès lors que l'écoulement considéré n'est plus uniforme. Bien que, par définition, l'interface possède une épaisseur nulle, la pente de la fonction  $\Phi$  croît ou décroît suivant les cas. Il est alors nécessaire de la modifier périodiquement pendant le calcul de manière à ce que son gradient reste égal à l'unité. Cette opération constitue une étape supplémentaire qualifiée de « réinitialisation », et tend à changer la localisation de l'interface, à savoir le zéro de la fonction  $\Phi$ , ainsi qu'à entraîner des pertes de masse. Cependant, depuis les débuts de cette méthode, des progrès majeurs ont été accomplis; Adalsteinsson et Sethian [2] ont développé notamment une méthode qui permet de réduire considérablement le nombre de réinitialisations et améliore la conservation de la masse. Son principe est le suivant : modifier la valeur de la vitesse au voisinage de l'interface de manière à rendre l'écoulement localement uniforme pour que la pente de la fonction Level Set demeure constante. Ces récents développements font de cette méthode une technique relativement robuste, précise et élégante.

En conclusion, les méthodes de suivi en volume avec reconstruction d'interface ont pour principal avantage de permettre une localisation précise de l'interface. Il est relativement simple de traiter un écoulement avec plusieurs inclusions. La fonction caractéristique de phase ( $\tau$  ou  $\Phi$ ) est transportée sans difficulté supplémentaire. La reconnexion ou la rupture se produisent quand deux interfaces sont situées à l'intérieur d'une même maille. En contrepartie, ces phénomènes dépendent donc de la finesse du maillage choisi : les structures inférieures à la taille de la maille sont difficilement résolues, ce qui implique l'utilisation d'un grand nombre de mailles pour essayer de pallier à ce défaut. En outre, les algorithmes de reconstruction d'interface, inhérents à ce type d'approche, alourdissent de manière significative les calculs et leur extension en trois dimensions est très complexe. Dans le contexte de la pulvérisation agricole, ces méthodes ne semblent donc pas les plus adéquates pour la modélisation de l'atomisation des jets de buse.

Méthodes sans reconstruction d'interface

Une autre stratégie consiste à transporter la fraction volumique de l'une des phases mais sans s'attacher à reconstruire l'interface. Certes une partie de l'information est perdue mais on s'affranchit, en revanche, de certaines des limitations des méthodes VOF, puisque les algorithmes de reconstruction ne sont plus utiles. Les méthodes basées sur ce principe sont également appelées « méthodes de capture de front » (ou « Interface Capturing ») et sont, par conséquent, beaucoup plus simples à mettre en œuvre et moins gourmandes en temps de calcul. Tout comme les méthodes « Level Set », elles présentent l'avantage d'être capables de traiter sans difficulté aussi bien des écoulements en deux et en trois dimensions. Les prévisions données par ces méthodes peuvent être améliorées en introduisant le concept de densité interfaciale comme l'on fait de nombreux auteurs (Jav [41], Vallet [100]). Le principal inconvénient de ces méthodes réside dans l'étalement des fronts raides (diffusion numérique importante). Cet effet se manifeste surtout en présence de zone de fort cisaillement ou étirement. Dans ce cas, les gradients du taux de présence de phase sont sous-estimés, et certains phénomènes mal décrits. Le tableau II.1 suivant résume les avantages et les limitations des différentes méthodes de suivi d'interface présentées précédemment.

Méthodes de suivi d'interface			
Méthode	Avantages	Inconvénients	
Máthada da guirri	Reconstruction précise de l'interface	Problème de stabilité numérique	
de front		à l'interface	
		Modélisation difficile de la rup-	
		ture et de la reconnexion des in-	
		terfaces	
		Gestion complexe des marqueurs	
Máthadag MAC	Reconstruction aisée de l'interface	Mémoire importante requise pour	
Methodes MAC		le stockage des données	
		Gestion difficile des marqueurs	
	Position précise de l'interface	Modélisation difficile des struc-	
Méthodes VOF		tures de taille inférieure à la	
		maille	
		Lourdeur des algorithmes de re-	
		construction d'interface	
		Extension difficle des méthodes	
		de reconstruction en 3D	
Méthodes « Level	Localisation précise de l'interface	Modélisation difficile des struc-	
Set »		tures de taille inférieure à la	
		maille	
Méthodes sans	Absence d'algorithme complexe de	Position exacte de l'interface in-	
reconstruction	reconstruction	connue	
d'interface	Mise en œuvre simple	Difficulté à conserver des inter-	
		faces raides	

TAB. II.1 : Récapitulatif sur les méthodes de résolution de l'interface dans un modèle de mélange pour un écoulement diphasique

# II.3.3 Modèles à deux fluides

Dans ces modèles, les équations de transport de la Mécanique des fluides sont résolues pour chacune des phases. Cette démarche permet une prise en compte beaucoup plus fine des inhomogénéités cinématiques et thermodynamiques entre les phases. Elle permet notamment de considérer de manière explicite le glissement entre phases. En contrepartie, ce genre d'approche nécessite l'introduction d'une modélisation pour de nombreux termes interfaciaux, entre autres, les termes de transfert de masse, de quantité de mouvement et d'énergie, auxquels s'ajoutent les corrélations turbulentes relatives à chaque phase. De plus, dans le cas d'écoulements turbulents, ces modèles sont capables de réaliser un traitement spécifique de la turbulence à l'intérieur de chaque phase, et cela moyennant des relations de fermeture supplémentaires. Depuis 1975, date à laquelle Ishii [40] a défini les bases du modèle, de multiples améliorations ont été apportées.

De nombreuses études ont été réalisées au Laboratoire National d'Hydraulique (EDF) afin de modéliser les écoulements diphasiques dans les lits fluidisés denses. Ces travaux ont permis notamment de développer le code thermo-hydraulique ASTRID. Pour ce type de configurations, Simonin [90] propose une approche permettant de modéliser les écoulements 2D ou 3D diphasiques turbulents à inclusions dispersées, dans lesquels une des phases est constituée d'inclusions semi-rigides de petites tailles devant les échelles moyennes de la phase continue. Le principal intérêt de cette approche est de permettre de décrire de manière précise les interactions entre phases, concernant la turbulence (par le biais d'un modèle à deux équations de transport de type k- $\epsilon$ ) et la quantité de mouvement (par un bilan des forces (traînée, ...) s'exerçant sur les inclusions). Afin de rendre compte de l'effet de la présence des inclusions sur la turbulence de la phase continue, deux grandeurs supplémentaires sont introduites : l'énergie cinétique d'agitation pour représenter l'agitation des particules, et la covariance des vitesses fluides-particules pour modéliser le terme d'échange d'énergie turbulente entre la phase continue et la phase dispersée. De nombreuses validations (pour des configurations académiques et expérimentales) de ce modèle ont été effectuées, aussi bien sur des écoulement gaz-particules solides que sur des écoulements gaz-gouttes. Soulas [91] a notamment appliqué ce type de méthode à la modélisation d'un spray de carburant pour l'injection directe d'essence.

Une approche différente a été proposée par Saurel et Abgrall [85, 86] et s'applique aux écoulements avec propagation d'ondes de choc. Elle nécessite une mise en équation complète (résolution de sept équations : deux équations de continuité, deux équations de quantité de mouvement, deux équations d'énergie et enfin, une équation de transport pour la fraction volumique de la phase liquide), écrite sous forme hyperbolique. La fermeture de ce système est ensuite assurée avec des lois d'état décrivant le comportement thermodynamique de chacune des phases. Dans ce type de modèle, les transferts de quantité de mouvement sont pris en compte mais pas les quantités turbulentes. De plus, une modélisation fine des termes de relaxation (terme de retour à l'équilibre après passage d'une onde choc) est impérative. Ce genre d'approche nécessite l'utilisation de schémas numériques très précis.

Enfin, Kauffman [44] a développé un modèle diphasique Eulérien au Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS), dédié aux Simulations aux Grandes Echelles (SGE ,ou en anglais LES : Large Eddy Simulation) pour les écoulements diphasiques peu denses. Dans cette approche, les deux phases en présence sont considérées comme continues et, au final, le modèle se compose de six équations (continuité, quantité de mouvement et énergie pour chaque phase). Les échanges entre phases sont modélisés en supposant que la phase dispersée est composée de particules sphériques. L'évaluation des termes d'échange de masse et d'énergie est réalisée en se basant sur la théorie quasi-stationnaire pour une goutte en évaporation. En revanche, seule la force de traînée est prise en compte dans le calcul des échanges de quantité de mouvement du fait du fort rapport de masse volumique existant entre les phases.

Aux trois approches décrites ci-dessus, s'ajoutent dans la littérature celles d'Alajbegovic *et al* [4] dont les travaux ont contribué à développer le code FIRE de la société autrichienne AVL, de Marotaux [61] qui utilise un modèle à deux fluides pour décrire l'atomisation d'un film liquide sur une paroi, de Miyamoto et Kobayashi [64] qui modélise les sprays d'injecteurs assistés par air, et enfin, de Truchot [97] qui porte sur la modélisation des jets turbulents de carburant liquide dans les moteurs. Mais, tous ces modèles se retrouvent dans les trois cités précédemment.

Toutefois, malgré les avantages qu'offrent les modèles à deux fluides en termes de précision (prise en compte de la vitesse de glissement entre phases et présence d'équations d'état adaptées à chaque phase), le nombre d'équations à résoudre demeure relativement important et la modélisation des termes d'échanges interfaciaux, lors de l'atomisation, est complexe. En outre, des problèmes numériques peuvent apparaître dans les zones où la fraction volumique tend vers zéro.

# II.3.4 Conclusion

Les sections précédentes ont permis de distinguer les atouts et les contraintes des différents modèles diphasiques disponibles dans la littérature. Ces informations sont regroupées dans les tableaux II.2 et II.3. Le second tableau détaille les caractéristiques des méthodes à maillage fixe. Du point de vue du nombre de mailles à utiliser, les modèles de mélange et à deux fluides, sans reconstruction d'interface, semblent les plus appropriés pour une application. Les modèles à deux fluides garantissent la modélisation la plus fine des intéractions entre phases, mais le nombre considérable d'équations et de termes ouverts mis en jeu constitue un obstacle. Une des difficultés se situe, en effet, au niveau des relations de fermeture requises pour obtenir un système complet d'équations aux dérivés partielles permettant de décrire l'évolution de l'écoulement. Ces relations doivent fournir les informations perdues lors de l'application des opérateurs de moyenne aux équations de bilan locales instantanées. Elles doivent spécifier notamment les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre les phases. Les modèles de mélange présentent certains avantages, comme leur simplicité de mise en œuvre en trois dimensions et le nombre restreint d'équations à résoudre, qui en font des méthodes très attractives. Dans le cadre de notre étude, on ne prétend pas représenter en détail les phénomènes secondaires de la fragmentation d'un jet mais on s'interesse davantage à la modélisation de l'écoulement à l'intérieur d'une buse et dans la région proche de sa sortie. C'est pourquoi nous avons fait le choix d'utiliser un modèle de ce type. Cependant, il faudra garder à l'esprit les limites de ces modèles en ce qui concerne la vitesse relative entre les phases et porter une attention particulière au choix d'une équation d'état la plus adaptée possible à notre système. Dans le chapitre suivant, nous décrirons précisément les équations à résoudre et leur traitement numérique au sein du code de calcul.

A titre d'information, la figure II.28 rappele le principe général de mise en œuvre d'un modèle diphasique.

Méthodes de modélisation diphasique			
Méthode	Avantages	Inconvénients	
Modèles à deux	Existence d'une équation d'état	Nombreuses équations à résoudre	
	pour chaque fluide	et nombreux termes d'échanges	
IIIIIIII		interfaciaux à modéliser	
	Extension simple en 3D	Problème de stabilité des schémas	
		numériques lorsque la fraction vo-	
		lumique tend vers 0	
	Prise en compte implicite de la vi-		
	tesse de glissement		
	Nombre raisonnable d'équations	Difficulté à établir une équation	
Modèles de		d'état adaptée pour décrire le mé-	
mélange		lange	
	Application aisée au calcul tridi-	Absence de résolution explicite de	
	mensionnel et implantation rela-	la vitesse de glissement	
	tivement simple dans un code		
	Prise en compte implicite des	Diffusion numérique au niveau de	
	changements de phase	l'interface	
		Hypothèse d'homogénéité des	
		phases	
Méthodes à	Résolution exacte des bilans à	Position et forme des inclusions	
maillage mobile	l'interface	définies a priori	
		Surcoût de calcul en raison des re-	
		connexions de maillages pour les	
		changements de topologie	
Méthodes à	Représentation précise de l'inter-	Mise en œuvre lourde	
maillage fixe	face		
		Application difficile aux écoule-	
		ments à forts gradients	

TAB. II.2 : Comparatif des différentes méthodes de modélisation diphasique

Méthodes à maillage fixe				
Méthode	Avantages	Inconvénients		
	Localisation explicite de l'inter-	Utilisation d'algorithmes de re-		
Méthodes de suivi	face	construction coûteux en temps de		
en volume		calcul et complexes en 3D		
	Traitement aisé des changements	Dépendance de la précision avec		
	de topologie et de plusieurs inclu-	le raffinement du maillage (diffu-		
	sions	sion numérique du front)		
	Efficace et pratique en 2D	Difficilement applicable aux écou-		
		lements où existent de forts gra-		
		dients entre phases		
		Prise en compte difficile des chan-		
		gements de phase		
	Représentation précise de l'inter-	Représentation complexe en 3D		
Méthodes de suivi	face sans besoin de raffinement du			
de front	maillage (résolution à l'échelle de			
	la sous-maille)			
		Problèmes pour les changements		
		de topologie (introduction de cri-		
		tères de rupture ou de recon-		
		nexion)		
		Gestion difficile de la répartition		
		spatiale des marqueurs d'inter-		
		face		
		Présence éventuelle d'oscillations		
		numériques pour les forts gra-		
		dients		

 $\mathbf{TAB. \ II.3:} \ Comparaison \ des \ méthodes \ à maillage \ fixe$ 



FIG. II.28 : Modélisation des écoulements diphasiques

# Deuxième partie

# Modélisation Eulérienne de l'atomisation

# Chapitre III Modélisation de la dispersion du liquide

Dans ce chapitre et le suivant, sera présenté le modèle Eulérien développé par Ariane Vallet et Roland Borghi pour la fragmentation des jets d'injection automobile. Dans un second temps, nous préciserons les modifications apportées à ce modèle initial dans le cadre de notre étude.

# III.1 Bases théoriques

Afin d'appréhender correctement la partie dense du spray, l'approche utilisée est issue de la modélisation des écoulements turbulents à masse volumique variable développée par Roland Borghi [102, 103]. Une analogie entre le régime turbulent et celui d'atomisation est réalisée et permet de poser les bases du modèle mis en œuvre. En régime turbulent, *i.e.* à fort nombre de Reynolds, la viscosité agit uniquement sur les petites échelles de l'écoulement, et est négligeable aux grandes échelles. De même, en régime d'atomisation, c'est à dire pour de forts nombres de Weber, la capillarité n'intervient pas pour le calcul des grandes échelles. Elle joue, dans le régime d'atomisation, un rôle similaire à celui de la viscosité en turbulence, ce qui se traduit par une généralisation de l'hypothèse de Kolmogorov. Il est donc possible de négliger son influence pour le calcul de la dispersion du liquide. Le modèle à partir duquel nous avons construit notre modélisation a été initialement utilisé par Vallet [102] pour modéliser les écoulements au sein des moteurs à combustion interne. Pour ce type particulier d'application, les pressions imposées sont très élevées. Dans le cadre de cette thèse, nous avons essayé d'appliquer ce modèle à une configuration très éloignée des précédentes : le jet de liquide produit par une buse de pulvérisation agricole. Dans ce cas, les pressions mises en jeu sont bien plus faibles.

Comme on l'a déjà souligné, la fragmentation primaire d'un jet liquide en régime d'atomisation a lieu très près du nez de la buse, *i.e.* dans une région très dense en liquide. Il est donc possible d'appliquer une modélisation Eulérienne à une seule vitesse, même si, en toute rigueur, il serait préférable d'avoir recours à une modélisation Eulérienne à deux vitesses étant donné que l'écoulement examiné concerne deux fluides, un gaz et un liquide. La mise en œuvre d'une telle modélisation serait particulièrement ardue, notamment, en ce qui concerne le calcul des pressions.

On considère donc l'écoulement turbulent d'un « pseudo-fluide » avec une masse volumique comprise entre celle d'un liquide et celle d'un gaz. La description de cet écoulement est assurée par différentes variables représentatives du mélange : la masse volumique  $\rho$ variant entre celle du liquide  $\rho_g$  et celle du gaz  $\rho_l$ , les trois composantes de la vitesse  $u_i$  (i = 1, 2, 3), la pression p et enfin, la fraction massique de liquide Y. Les notations introduites ici serviront pour la suite.

Par ailleurs, il est important de noter que les effets gravitationnel et thermique sont négligés. En outre, dans un souci de simplicité, le gaz considéré est mono-espèce, mais une généralisation à plusieurs espèces serait envisageable et relativement immédiate.

# III.2 Equations instantanées

Rappelons d'abord la forme générale des équations de bilan instantanées. Ces équations de la Mécanique des Fluides proviennent des principes de conservation. Concernant leur écriture pour un milieu à deux phases, il faut se référer à [43].

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \tag{III.1}$$

où t correspond à la variable temps et les  $x_i$  aux trois composantes de l'espace.

# Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho \, u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \, u_i \, u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_{cap} \tag{III.2}$$

Dans cette équation,  $\tau_{ij}$  désigne le tenseur des contraintes visqueuses. Il s'agit d'un tenseur symétrique et de trace nulle. Le fluide étant supposé Newtonien, il s'écrit sous la forme suivante :

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \left( \frac{\lambda}{\mu} - \frac{2}{3} \right) \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \right)$$
(III.3)

où  $\mu$  représente le coefficient de viscosité dynamique du fluide, et  $\lambda$  est nul uniquement pour un gaz mono-atomique. Enfin,  $\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker défini par :

$$\delta_{ij} = \delta_i^j = \delta^{ij} \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Et  $F_{cap}$  représente la force capillaire.

# Conservation de la fraction massique de liquide :

$$\frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y}{\partial x_i} = 0 \tag{III.4}$$

Il est important de noter que dans ces équations instantanées, les quantités  $\rho$  et Y peuvent être discontinues; la fonction indicatrice de phase Y vaut 1 en présence de la phase liquide et 0 sinon, et la masse volumique  $\rho$  est égale à  $\rho_g$  ou  $\rho_l$ . Ces équations doivent donc être considérées au sens des distributions.

Par ailleurs, on suppose que l'équation d'état (à chaque instant) du liquide est  $\rho_l =$ 

constante et celle du gaz  $\rho_g = constante$ .

# III.3 Equations du modèle

Les équations précédentes permettent de décrire l'écoulement. Cependant, elles ne peuvent généralement pas être résolues de manière analytique. Leur résolution rend donc obligatoire l'utilisation de méthodes numériques d'intégration, comme la méthode aux volumes finis. Dans la grande majorité des cas, une représentation correcte des phénomènes physiques impliqués nécessiterait des maillages trop importants pour envisager une résolution directe. Ce qui est d'autant plus vrai lorsque l'écoulement que l'on souhaite étudié est turbulent puisque toutes les variables fluctuent de façon aléatoire dans l'espace et le temps. Quand bien même une résolution directe s'avèrerait possible en termes de capacité de calcul, les conditions aux limites ne seraient pas suffisamment connues. Dès lors qu'on considère des écoulements réalistes, une alternative consiste à ne s'intéresser qu'aux quantités moyennes et par conséquent à obtenir les équations décrivant leur évolution. Pour ce faire, on applique un opérateur de moyenne sur les équations instantanées en pratiquant la décomposition de chaque variable en une partie moyenne et une partie fluctuante. Les nouvelles équations ainsi obtenues sont dites « équations moyennées ».

# III.3.1 Opérateurs de moyenne

Il apparaît nécessaire, avant de continuer, de définir les outils mathématiques qui vont permettre le passage des équations instantanées du mouvement aux équations moyennées. Deux types de moyenne sont communément utilisés en Mécanique des Fluides : la moyenne de Reynolds et celle de Favre.

La moyenne de Reynolds, appelée aussi moyenne d'ensemble, notée - est telle que, si on enregistre la valeur de la quantité qui nous intéresse pour la même position et pour le même temps,  $f_i$ , au cours de N réalisations indépendantes portant sur le même écoulement, alors :

$$\overline{f} = \lim_{N \to +\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f_i$$

A partir de cette opérateur de moyenne, on définit la décomposition de Reynolds d'une quantité quelconque de l'écoulement f en deux parties distinctes :

$$f = f + f'$$

où  $\overline{f}$  et f' désignent respectivement la valeur moyenne de Reynolds et la partie fluctuante. Soit,

$$f' = f - \overline{f}$$

Par définition,  $\overline{f'} = 0$ .

Cet opérateur de moyenne vérifie également les propriétés suivantes :

$$\overline{f+g} = \overline{f} + \overline{g}$$

 $\overline{\beta f} = \beta \overline{f}$  si  $\beta$  est une constante

$$\overline{\overline{f}} = \overline{f}$$
$$\overline{\overline{f} g} = \overline{f} \overline{g}$$
$$\overline{\overline{\partial} f} = \frac{\partial \overline{f}}{\partial x_i}$$
$$\overline{\frac{\partial f}{\partial t}} = \frac{\partial \overline{f}}{\partial t}$$

Cependant, l'utilisation d'une telle décomposition dans le cas d'un écoulement à masse volumique variable accroît la complexité des équations au sens où elle fait apparaître explicitement toutes les contributions des variations de masse volumique au mouvement turbulent moyen via des termes supplémentaires. Par exemple, pour un terme comme  $\rho u$ , on a :  $\rho u = \overline{\rho} \,\overline{u} + \overline{\rho} \,u' + \rho' \,\overline{u} + \rho' \,u'$  et donc  $\overline{\rho u} = \overline{\rho} \,\overline{u} + \overline{\rho'} \,u'$ .

Comme dans le cas qui nous intéresse, la masse volumique peut fluctuer, il est plus adéquat d'utiliser une « moyenne pondérée par la masse » que l'on nomme moyenne de Favre, notée  $\sim$  et définie comme suit :

$$\widetilde{h} = \frac{\rho h}{\overline{\rho}}$$

A partir de cette nouvelle moyenne, on obtient la décomposition suivante, pour toute variable h :

$$h = \widetilde{h} + h''$$

où  $\widetilde{h}$  n'est autre que la composante moyenne et h'' la composante fluctuante. Et la partie fluctuante de h sera donnée par :

$$h'' = h - \tilde{h}$$

Il s'ensuit :

$$\overline{\rho \ h''} = 0$$

 $\operatorname{et}$ 

$$\overline{h''} = -\frac{\overline{\rho' \ h''}}{\overline{\rho}}$$

Comme la moyenne classique, l'opérateur de Favre est linéaire; il est également idem-

potent puisque :

 $\widetilde{f}\,\widetilde{\widetilde{g}} = \widetilde{f}\,\widetilde{g}$ 

De même :

$$\overline{f\,\widetilde{g}} = \overline{\overline{f}\,g} = \overline{f}\,\widetilde{g}$$

Par ailleurs, on notera que :

$$\widetilde{h''} = 0$$
$$\widetilde{h} = \widetilde{\widetilde{h}}$$
$$\overline{\rho h} = \overline{\rho} \widetilde{h}$$

Le formalisme des moyennes pondérées par la masse volumique, introduit par Favre est bien adapté pour décrire les écoulements à masse volumique variable. Son utilisation permet, en effet, une simplification significative des équations de bilan : les équations obtenues conservent quasiment la même forme que les équations originales (instantanées). Dans le modèle utilisé, cette décomposition s'applique à toutes les variables de l'écoulement excepté la masse volumique et la pression pour lesquelles la moyenne de Reynolds est privilégiée.

# III.3.2 Equations moyennées

Les équations moyennées sont obtenues en moyennant les équations de Navier-Stokes (équations III.1, III.2, III.4), après avoir décomposé chaque grandeur instantanée en un terme moyen et un terme fluctuant. On obtient finalement le système d'équations suivant :

### III.3.2.1 Equations de conservation de la masse moyennée :

$$\frac{\partial \,\overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \,\overline{\rho} \,\widetilde{u_j}}{\partial \,x_j} = 0 \tag{III.5}$$

On remarque que la moyenne de Favre permet ici de garder la même forme pour l'équation moyenne que pour l'équation instantanée d'origine.

### III.3.2.2 Equations de conservation de la quantité de mouvement moyennée :

$$\frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i}}{\partial \,t} + \frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i}\,\widetilde{u_j}}{\partial \,x_j} = -\frac{\partial \,\overline{p}}{\partial \,x_i} + \frac{\partial \,\overline{\tau_{ij}}}{\partial \,x_j} - \frac{\partial \,\overline{\rho}\,u_i''\,u_j''}{\partial \,x_j} \tag{III.6}$$

Cette équation de transport ne fait intervenir aucun terme d'échange entre les phases car il s'agit d'une équation sur la vitesse moyenne du mélange. De plus, le terme de capillarité n'apparaît pas parce qu'on suppose que la capillarité ne joue qu'à petite échelle, et pas pour l'écoulement moyen. La pression utilisée ici représente la pression du mélange diphasique. On constate, en revanche, que, du fait de la non linéarité des termes de convection dans les équations instantanées, la procédure de moyenne fait apparaître de nouvelles inconnues sous forme de corrélations doubles de vitesse fluctuante. Le terme  $\overline{\rho} \ u_i'' u_j''$  désigne le tenseur des contraintes de Reynolds ou contraintes turbulentes qui s'expriment aussi  $R_{ij} = \overline{\rho} \ u_i'' u_j''$ ; il s'agit d'un tenseur symétrique dont la trace est égale au double de l'énergie cinétique de la turbulence  $\widetilde{k}$ .

# III.3.2.3 Equation d'état

Puisque le liquide et le gaz sont à masses volumiques constantes, l'équation d'état moyenne du milieu moyen à deux phases est simplement :

$$\overline{\rho} = \frac{\rho_g}{1 - \widetilde{Y} \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_l}\right)} \tag{III.7}$$

Elle relie la masse volumique moyenne du mélange  $\overline{\rho}$  à celles du gaz  $\rho_g$  et du liquide  $\rho_l$  ainsi qu'à la fraction massique moyenne de la phase liquide  $\widetilde{Y}$ .

# III.3.2.4 Equations de conservation de la fraction massique de liquide moyennée :

$$\frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{Y}}{\partial t} + \frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i}\,\widetilde{Y}}{\partial \,x_i} = -\frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i''\,Y''}}{\partial \,x_i} \tag{III.8}$$

Cette équation se présente sous la même forme que celle d'un scalaire sans terme de diffusion moléculaire car on considère de grands Reynolds. Toutefois, l'ajout d'un terme source/puit prenant en considération divers phénomènes physiques telle l'évaporation est envisageable. A son tour, cette équation introduit une inconnue supplémentaire,  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_j Y''}$ , qui correspond à la corrélation entre les fluctuations de vitesse et de fraction massique. Ce dernier terme permet de représenter la dispersion du liquide, et par conséquent, l'angle du jet caractéristique de l'étalement du liquide dans le gaz.

Dans les équations moyennées précédentes, les quantités  $\overline{\rho}$ ,  $\widetilde{u_i}$  et  $\widetilde{Y}$  ne peuvent être discontinues. De plus, il est à noter que, conformément aux idées fondamentales du modèle en question, pour de forts nombres de Reynolds et de Weber, ces équations ne font intervenir ni la viscosité, ni la tension de surface.

Ainsi, les deux inconnues du système d'équations qui vient d'être présenté (équations III.5, III.6 et III.8) sont le **flux turbulent de la fraction massique de liquide**,  $\overline{\rho} \widetilde{u''_j Y''}$  et le **tenseur de Reynolds**,  $\overline{\rho} \widetilde{u''_i u''_j}$ . Dans la section qui suit, nous rappelons donc les fermetures proposées par Ariane Vallet et Roland Borghi, puis, nous mettrons l'accent sur celles que nous avons décidé de retenir pour notre étude particulière.

# III.4 Fermeture du tenseur de Reynolds $\overline{\rho} \, \widetilde{u}''_i \, \widetilde{u}''_j$ et modélisation de la turbulence du mélange

Etant donné la complexité des équations mises en jeu, nous décrirons, dans un premier temps, les principales procédures de fermeture disponibles dans la littérature, puis, dans un second temps, nous exposerons les relations et équations réellement considérées dans le cadre de ces travaux de thèse.

Comme on vient de le voir, l'effet de moyenne engendre une perte d'information, caractérisée ici par l'apparition de la corrélation inconnue  $\widetilde{u''_i u''_j}$ . Pour résoudre ce problème de fermeture, il est nécessaire d'introduire des relations constitutives pour relier le tenseur de Reynolds à d'autres corrélations ou moyennes connues ou calculables.

# III.4.1 Différents niveaux de fermeture

La modélisation de ces corrélations du second ordre peut être réalisée de différentes façons. Les modèles les plus simples à mettre en œuvre correspondent à ceux basés sur le concept de **viscosité turbulente**. D'autres modèles plus rigoureux mais bien évidemment davantage complexes consistent à résoudre une équation de transport pour chaque composante du tenseur de reynolds  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_{i}} \, u''_{j}$ . Entre ces deux types de modèles se situent les modèles algébriques qui, comme leur appellation l'indique, expriment chaque corrélation de manière algébrique. Parmi ces derniers, figure le modèle A.S.M (« Algebraic Stress Model ») développé par Rodi [79]. Ces différents modèles sont brièvement passés en revue au travers des sections suivantes et nous nous attarderons sur celui choisi pour notre étude.

# III.4.1.1 Modèles à viscosité turbulente ou modèles du premier ordre

Le tenseur de Reynolds provenant de la non-linéarité du terme de convection de l'équation de quantité de mouvement apparaît comme un tenseur des contraintes dans l'équation III.6. Par similitude avec la loi de comportement d'un fluide visqueux reliant le tenseur des contraintes visqueuses au champ de vitesse, Boussinesq [13] a proposé de relier le tenseur de Reynolds au champ moyen de vitesse par :

$$-\overline{\rho}\,\widetilde{u_i''u_j''} = \mu_t\,\left(\frac{\partial\,\widetilde{u_i}}{\partial\,x_j} + \frac{\partial\,\widetilde{u_j}}{\partial\,x_i} - \frac{2}{3}\,\frac{\partial\,\widetilde{u_l}}{\partial\,x_l}\,\delta_{ij}\right) - \frac{2}{3}\,\overline{\rho}\,\widetilde{k}\,\delta_{ij} \tag{III.9}$$

où  $\tilde{k}$  représente l'énergie cinétique turbulente et  $\mu_t$  le coefficient de viscosité dynamique turbulente, appelé plus simplement viscosité turbulente. A la différence de la viscosité moléculaire, cette viscosité n'est pas une propriété du fluide mais constitue une caractéristique du mouvement turbulent. Le dernier terme de l'équation III.9 est ajouté pour des raisons purement mathématiques lors de la contraction des indices. Par définition, en effet, on a la relation suivante :

$$\widetilde{k} = \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_i''}$$

L'objectif des modèles qui vont être présentés dans ce qui suit est de **calculer la** viscosité turbulente  $\mu_t$  afin de déterminer le champ de vitesse moyen. La viscosité cinématique  $\nu_t = \frac{\mu_t}{\overline{\rho}}$  peut s'écrire dimensionnellement sous forme d'un produit entre une échelle de vitesse  $u^*$  et une échelle de longueur  $l^*$  caractéristiques de la turbulence :

$$\nu_t \approx u^* l^*$$

Le principe de certains modèles de turbulence est donc de déterminer à la fois une échelle de vitesse et une échelle de longueur caractéristique de la turbulence : la vitesse y est souvent déduite de l'énergie cinétique turbulente car  $u^* \approx \sqrt{\tilde{k}}$  et l'échelle de longueur  $l^*$  est calculée soit via une relation algébrique soit via une équation de transport.

Pour ces modèles du premier ordre, une classification est établie en fonction du nombre d'équations d'évolution supplémentaires du modèle :

#### Modèles de longueur de mélange

La particularité des modèles de longueur de mélange est de calculer l'échelle de vitesse  $u^*$  non pas à partir de  $\tilde{k}$  mais au moyen d'une relation algébrique. La viscosité turbulente est alors fonction du gradient de vitesse moyenne et d'une longueur appelée longueur de mélange,  $l_m$  et suit la relation suivante :

$$\mu_t = \overline{\rho} \, l_m^2 \, \left| \frac{\partial \, \widetilde{u}_i}{\partial \, x_j} + \frac{\partial \, \widetilde{u}_j}{\partial \, x_i} \right|$$

La longueur de mélange, trouvée de manière empirique, est censée représenter l'échelle de longueur des grosses structures (tourbillons) qui assurent la diffusion des grandeurs moyennes [63]. De ce fait, ce type de modèle requiert une connaissance *a priori* de l'écoulement d'étude. En revanche, ils ne nécessitent pas la résolution d'équations de transport supplémentaires, c'est pourquoi, on les qualifie habituellement de « modèles à zéro équation ».

# Modèles à une ou deux équation

Ces modèles reposent sur le calcul de l'énergie cinétique turbulente, k, via son équation de transport. Cette équation sera décrite par la suite dans ce manuscrit. L'échelle de vitesse des grosses structures est dès lors connue. Pour fermer les équations de mouvement moyennées à partir de la relation de Boussinesq, il suffit alors de déterminer l'échelle de longueur.

Pour les modèles à une équation, cette échelle de longueur l est calculée grâce à une relation algébrique comme pour les modèles de longueur de mélange. La viscosité turbulente quant à elle est donnée par :

$$\mu_t = C^1_\mu \,\overline{\rho} \,\sqrt{\widetilde{k} \,l}$$

où  $C^1_{\mu}$  est une constante. Ces modèles présentent l'avantage d'être assez simples mais le choix de l'échelle de longueur est empirique et l'extension au cas tridimensionnel est difficile.

Dans les modèles à deux équations, une équation de transport pour une grandeur reliée explicitement à l'échelle de longueur caractéristique des grosses structures  $l^*$  est utilisée. Parmi ces modèles, un des plus connu est le modèle  $(\tilde{k}, \tilde{\epsilon})$  où  $\tilde{\epsilon}$  n'est autre que le taux de disssipation de l'énergie cinétique turbulente  $\tilde{k}$ . Il a pour atout de prendre en compte les variations spatiales de l'agitation turbulente mais il est mal adapté aux écoulements complexes. La viscosité turbulente possède dans ce cas l'expression suivante :

$$\mu_t = C_\mu \, \frac{\overline{\rho} \, \widetilde{k}^2}{\widetilde{\epsilon}} \tag{III.10}$$

où  $C_{\mu}$  désigne une constante,  $C_{\mu} = 0,09$ .

D'une manière générale, une des limitations des modèles basés sur le concept de viscosité turbulente est de relier localement les échelles caractéristiques des grosses structures à l'écoulement moyen et par conséquent, d'aboutir à la perte de certains effets d'histoire de la turbulence. Une alternative possible pour dépasser cette restriction est de considérer un modèle d'ordre supérieur dans lequel les tensions de Reynolds sont calculées à partir de leur équation de transport et non par une relation algébrique.

### III.4.1.2 Modèles du second ordre

Ces modèles dits à contraintes turbulentes algébriques ou Rij-epsilon ou encore RSM (pour « Reynolds Stress Models »), se distinguent des précédents par le fait que l'équation de transport des tensions de Reynolds est résolue tout comme les équations du champ moyen. La fermeture de cette équation de transport représente donc un des points essentiels des modèles de turbulence en un point. L'intérêt des modèles RSM par rapport aux modèles du premier ordre est de permettre de s'affranchir d'une relation locale entre les tensions de Reynolds et l'écoulement moyen. Ces modèles assurent donc une meilleure prise en compte des effets de l'histoire et d'anisotropie de la turbulence. Ils ont montré une supériorité indéniable concernant la prédiction de l'**anisotropie** (étude des zones proches des parois, décollement,...) et des **écoulements avec tourbillons**. Ils permettent également d'éviter une sur-estimation de l'énergie cinétique dans le cas de forts cisaillements (écoulements avec séparation de région). De plus, le terme de production de turbulence qui sera présenté dans la suite de ce rapport est un terme exact et par conséquent ne nécessite pas de modèle de fermeture.

Des modèles d'ordre supérieur, basés sur la fermeture d'équations de transport d'ordre égal ou supérieur à trois, sont, en revanche, difficilement envisageables d'une part par manque de données expérimentales pour ce type de corrélations, et d'autre part par la lourdeur de la démarche engagée. Les modèles RSM constituent, par conséquent, un bon intermédiaire entre les modèles à viscosité turbulente et les méthodes de type Simulation des Grandes Echelles (SGE ou LES pour Large-Eddy Simulation en anglais).

Il est clair que la qualité des résultats de la modélisation dépendra du modèle utilisé. Son choix est bien sûr subordonné au type d'information que l'on souhaite recueillir. Sur le tableau suivant, est résumé le type d'information qu'il est possible d'obtenir suivant le modèle employé.

Modèle du premier	Champs moyens cas simples	Vitesse, pression, caractéristiques
ordre sans équation		globales
de transport		
Modèle du premier	Champs moyens cas plus	Vitesse, pression, caractéristiques
ordre avec équation	complexes + grandeurs tur-	globales, énergie cinétique turbu-
de transport	bulentes caractéristiques	lente, dissipation turbulente
Modèle du second	Champs moyens + champs	
ordre	fluctuants moyennés (mo-	
	ments)	

TAB. III.1 : Informations fournies suivant les différents niveaux de fermeture

# III.4.2 Equation de transport des tensions de Reynolds

Le modèle de turbulence aux tensions de reynolds consiste à résoudre des équations de transport pour chaque composante du tenseur de Reynolds. Les équations à résoudre ainsi que le choix des constantes de fermeture ne sont pas ausi « standards » que pour le modèle  $(\tilde{k}, \tilde{\epsilon})$ . Elles donnent, à ce jour, encore lieu à des travaux de recherche.

Dans un premier temps, détaillons l'équation de transport du tenseur des contraintes de Reynolds.

Cette équation de transport est classique, elle a été au centre de nombreuses études, cela dans le cas où la masse volumique du fluide est constante (cf. entre autres les ouvrages [20, 63, 87, 103]). En revanche, dans notre étude, la masse volumique moyenne du mélange n'est pas constante, la divergence de la vitesse moyenne n'est pas nulle, et donc on doit généraliser la discussion classique de la modélisation de cette équation.

A partir de l'équation de quantité de mouvement instantanée III.2, il est posible d'obtenir l'équation de transport des tensions de Reynolds dans sa formulation exacte. Le produit de l'équation III.2 selon  $x_i$  par la fluctuation  $u''_j$  donne une nouvelle équation. La permutation des indices i et j ensuite conduit à une autre équation. En prenant la moyenne de la somme de ces deux équations et en utilisant l'équation de conservation de la masse III.5, on obtient finalement :

$$\frac{\partial \overline{\rho} \, \widetilde{u_{i}'' \, u_{j}''}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \, \widetilde{u_{k}} \, \widetilde{u_{i}'' \, u_{j}''}}{\partial x_{k}} = \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_{k}} \left[ \overline{\rho} \, \widetilde{u_{i}'' \, u_{j}'' \, u_{k}''} + \overline{p' \left( \delta_{kj} \, u_{i}'' + \delta_{ik} \, u_{j}' \right)} - \overline{\mu \, S_{ik} \, u_{j}''} - \overline{\mu \, S_{jk} \, u_{i}''} \right]}_{(i)}}_{\underbrace{-\overline{\rho} \, \widetilde{u_{i}'' \, u_{k}''} \, \frac{\partial \widetilde{u_{j}}}{\partial x_{k}} - \overline{\rho} \, \widetilde{u_{j}'' \, u_{k}''} \, \frac{\partial \widetilde{u_{i}}}{\partial x_{k}} - \overline{u_{i}'' \, \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_{j}}} - \overline{u_{j}'' \, \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_{i}}}_{(iii)}}_{\underbrace{-\overline{\mu} \, S_{ik} \, \frac{\partial u_{j}''}{\partial x_{k}} - \overline{\mu} \, S_{jk} \, \frac{\partial u_{i}''}{\partial x_{k}}}_{(iv)} + \overline{p' \left( \frac{\partial u_{i}'' + \partial u_{j}'}{\partial x_{i}} + \frac{\partial u_{j}''}{\partial x_{i}} \right)}} \quad (\text{III.11})$$

(i) Terme de diffusion :

$$\overline{\rho} D_{ij} = \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} u_k^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^t} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \overline{p^{\prime} \left( \delta_{kj} u_i^{\prime\prime} + \delta_{ik} u_j^{\prime\prime} \right)} \right]}_{D_{ij}^p} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( -\overline{\mu} S_{ik} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} - \overline{\mu} S_{jk} u_i^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} + \overline{\mu} S_{jk} u_j^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} + \overline{\mu} S_{jk} u_j^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_i^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime} \right)}_{D_{ij}^\mu} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} u_j^{\prime\prime} u_j^{\prime\prime}$$

où  $D_{ij}^t$ ,  $D_{ij}^p$  et  $D_{ij}^{\mu}$  sont appelés respectivement termes de diffusion turbulente, de diffusion par la pression et de diffusion par le mouvement moléculaire.

(*ii*) Terme de production de turbulence par le mouvement moyen :

$$\overline{\rho} P_{ij} = -\overline{\rho} \widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_k} - \overline{\rho} \widetilde{u_j'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_k}$$
(III.12)

(iii) Terme d'interaction du champ de pression moyenne avec les fluctuations de masse volumique :

$$C_{ij} = -\overline{u_i''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} - \overline{u_j''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}$$
(III.13)

(iv) Terme de dissipation sous l'effet de la viscosité moléculaire :

$$\overline{\rho} \Sigma_{ij} = \overline{\mu \, S_{ik} \, \frac{\partial \, u_j''}{\partial \, x_k}} + \overline{\mu \, S_{jk} \, \frac{\partial \, u_i''}{\partial \, x_k}} = \frac{2}{3} \, \overline{\rho} \, \widetilde{\epsilon} \, \delta_{ij} \tag{III.14}$$

où  $\tilde{\epsilon}$  est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente et sera détaillé ultérieurement (paragraphe III.4.2.3).

(v) Terme de corrélation pression-déformation :

$$\Phi_{ij} = \overline{p'\left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i}\right)}$$
(III.15)

Dans ces différents termes, la quantité  $S_{ij}$  désigne :

$$S_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij}$$
(III.16)

On peut remarquer que ce terme n'est autre que :  $\frac{\tau_{ij}}{\mu}$  (voir équation III.3).

Nous avons adopté cette notation pour les différents termes de l'équation de transport des tensions de Reynolds de manière à rester homogène avec les données bibliographiques. Toutefois, on pourra trouver dans la littérature, suivant les auteurs,  $P_{ij}$  et  $D_{ij}$  au lieu de  $\bar{\rho} P_{ij}$ ,  $\bar{\rho} D_{ij}$ .
L'équation de transport du tenseur des contraintes de Reynolds peut donc s'écrire aussi sous la forme condensée suivante :

$$\frac{\partial \,\overline{\rho} \,\widetilde{u_i'' \,u_j''}}{\partial \,t} + \frac{\partial \,\overline{\rho} \,\widetilde{u_k} \,\widetilde{u_i'' \,u_j''}}{\partial \,x_k} = \overline{\rho} \left( D_{ij} + P_{ij} - \Sigma_{ij} \right) + \Phi_{ij}$$

Dans cette équation, les termes de convection et de production  $P_{ij}$  sont explicites en fonction de  $\widetilde{u''_i u''_j}$  et  $\widetilde{u_i}$  et ne nécessitent pas de modélisation. En revanche, les termes de diffusion  $\overline{\rho} D_{ij}$ , de dissipation  $\overline{\rho} \Sigma_{ij}$  et de corrélation pression déformation  $\Phi_{ij}$  doivent être modélisés afin de parvenir à la fermeture du système d'équations. Les sections suivantes décrivent les modélisations adoptées pour chacun de ses termes.

#### III.4.2.1 Modélisation du terme de diffusion $\overline{\rho} D_{ij}$

La plupart des modèles pour le terme de diffusion néglige la diffusion moléculaire compte tenu du caractère turbulent des écoulements en question. Cependant, dans notre étude, nous avons choisi de conserver ce terme afin de mesurer son influence. De même, la majorité des modèles négligent la diffusion par la pression si bien que l'on est ramené au seul problème de fermeture de la corrélation triple  $u_i'' u_j'' u_k''$ . Le modèle de diffusion proposé par Daly et Harlow [24] reprend le principe de modélisation par gradient mais sous une forme généralisée nommée GGDH (« Generalized Gradient Diffusion Hypothesis ») afin de prendre en compte l'anisotropie spatiale des grosses structures et exprime cette corrélation triple comme suit :

$$\overline{\rho} D_{ij} = -\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' \, u_j'' \, u_k''} \right) = C_s' \, \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\overline{\rho} \, \widetilde{k}}{\widetilde{\epsilon}} \, \widetilde{u_k'' \, u_l''} \, \frac{\partial \, \widetilde{u_i'' \, u_j''}}{\partial x_l} \right) \tag{III.17}$$

où  $C'_s$  est une constante. Mais, pour ce terme, on utilise généralement une expression plus simple, celle donnée par le modèle de Lien *et al* [54] et adoptée d'ailleurs dans le code Fluent :

$$\overline{\rho} D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_l} \right)$$
(III.18)

où  $\sigma_k = 0,82$  et la viscosité turbulente  $\mu_t$  est donnée comme pour le modèle  $(\tilde{k}, \tilde{\epsilon})$  par la relation III.10.

# III.4.2.2 Modélisation du terme de corrélation fluctuation de vitesse-gradient de pression $C_{ij}$

Ce terme est absent quand on considère les équations moyennées au sens de Reynolds mais apparaît lorsque l'on applique la décomposition de Favre à ces mêmes équations. En effet, dans ce cas pour un écoulement à masse volumique variable,  $\overline{u_i''} \neq 0$ . Des travaux sur la modélisation de ce terme ont été réalisés, entre autres, par Champion *et al* [8].

Ce terme peut être calculé de façon exacte en utilisant la formule III.19 suivante :

$$\overline{u_i''} = \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' Y''} \left( \frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \tag{III.19}$$

Il ne pose pas de problème de calcul; pour l'instant, nous l'avons négligé mais il est envisagé de l'intégrer dans nos calculs afin d'améliorer encore notre modélisation. Ce terme peut être positif ou négatif, suivant les cas. Cependant, il n'est important que si le gradient de pression moyen est très grand, et peut être négligé si ce gradient n'est pas fort.

#### III.4.2.3 Modélisation du terme de dissipation visqueuse $\overline{\rho} \Sigma_{ij}$

En écoulement à grand nombre de reynolds, l'hypothèse d'isotropie locale de la turbulence, au niveau des petits tourbillons où se produit la dissipation, conduit à exprimer  $\Sigma_{ij}$  par :

$$\Sigma_{ij} = \frac{2}{3} \,\widetilde{\epsilon} \,\delta_{ij}$$

Le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente  $\tilde{\epsilon}$ , qui intervient ici, doit être prédit par une équation supplémentaire qui, dans sa formulation la plus couramment utilisée, s'écrit :

$$\frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{\epsilon}}{\partial \,t} + \frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{\epsilon}\,\widetilde{u}_l}{\partial \,x_l} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial \,x_l} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \,\widetilde{\epsilon}}{\partial \,x_l} \right]}_{(i)} \underbrace{+ C_{\epsilon 1} \,\frac{\widetilde{\epsilon}}{\overline{k}} \,\frac{1}{2} \,\overline{\rho}\,P_{ii}}_{(ii)} \underbrace{- C_{\epsilon 2} \,\overline{\rho}\,\frac{\epsilon^2}{\overline{k}}}_{(iii)} \tag{III.20}$$

 $\begin{array}{l} (i) : \text{Diffusion de } \overline{\rho} \, \widetilde{\epsilon} \\ (ii) : \text{Production de } \overline{\rho} \, \widetilde{\epsilon} \\ (iii) : \text{Dissipation de } \overline{\rho} \, \widetilde{\epsilon} \end{array}$ 

Où  $\overline{\rho} P_{ii}$  est donné par l'équation III.12 et les constantes ont les valeurs standards :  $\sigma_{\epsilon} = 1, C_{\epsilon 1} = 1, 44, C_{\epsilon 2} = 1, 92.$ 

#### III.4.2.4 Modélisation du terme de corrélation pression-déformation $\Phi_{ij}$

Le tenseur  $\Phi_{ij}$  de corrélation pression-déformation ne fait que redistribuer les différentes composantes du tenseur de Reynolds, entre elles, sans changer l'énergie cinétique elle-même que dans le cas des écoulements à masse volumique constante, puisque sa trace est alors nulle. Ici, il n'est pas seulement un terme de redistribution, car sa trace est non nulle. Mais on a l'habitude de supposer cette dernière comme étant très faible pour les écoulements à masse volumique variable, parce que ce terme implique l'acoustique et que l'énergie acoustique est en général très petite devant l'énergie turbulente. Sa modélisation constitue une des difficultés majeures de la fermeture de l'équation du tenseur de Reynolds, elle fait toujours l'objet de controverses et de propositions différentes.

Le point de départ de ces diverses modélisations est l'expression exacte de  $\Phi_{ij}$  que l'on peut établir en exprimant la fluctuation de la pression à partir de l'équation de Poisson de la pression (Schiestel 1993). Le tenseur  $\Phi_{ij}$  s'exprime ainsi comme la somme de trois termes :

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij,1} + \Phi_{ij,2} + \Phi_{ij,w} \tag{III.21}$$

Dans cette expression,  $\Phi_{ij,2}$  caractérise l'interaction entre la turbulence et le mouvement moyen, il s'agit de la composante dite rapide du tenseur de corrélation pressiondéformation : elle réagit immédiatement au gradient de vitesse car elle en dépend de manière linéaire. Par opposition,  $\Phi_{ij,1}$  est appelé terme lent : elle fait seulement intervenir des fluctuations de vitesse. Ce terme est non linéaire, il est engendré par des interactions purement turbulentes. Enfin,  $\Phi_{ij,w}$  exprime, par une intégrale de surface, les interactions qui se produisent aux frontières du domaine d'écoulement (paroi, surface libre, ...). Détaillons à présent chacune de ces trois contributions :

- le terme non linéaire  $\Phi_{ij,1}$  traduit le retour à l'isotropie. Il est modélisé généralement comme une fonction du tenseur d'anisotropie des tensions de Reynolds et de la dissipation (modélisation de Rotta [80]) :

$$\Phi_{ij,1} = \phi_{ij,1} + \phi_{ji,1} = -C_1 \,\overline{\rho} \,\widetilde{\epsilon} \, b_{ij} \tag{III.22}$$

avec

$$b_{ij} = \frac{\widetilde{u''_i u''_j}}{\widetilde{k}} - \frac{2}{3} \,\delta_{ij} \tag{III.23}$$

où  $C_1$  est une constante prise égale à 1,8.

– pour la partie linéaire  $\Phi_{ij,2}$ , Gibson et Launder [33] adoptent une expression simplifiée en ne retenant que la dépendance du tenseur de production :

$$\Phi_{ij,2} = \phi_{ij,2} + \phi_{ji,2} = -C_2 \,\overline{\rho} \,\left(P_{ij} - \frac{2}{3} \,P_k \,\delta_{ij}\right) \tag{III.24}$$

où  $C_2 = O, 6, \overline{\rho} P_{ij}$  est donné par l'équation III.12, et enfin,  $\overline{\rho} P_k$  est un terme de production d'énergie cinétique turbulente défini par :

$$\overline{\rho} P_k = \frac{1}{2} \overline{\rho} P_{kk} = -\overline{\rho} \widetilde{u_k'' u_l''} \frac{\partial \widetilde{u_k}}{\partial x_l}$$
(III.25)

– le terme  $\Phi_{ij,w}$ , dans les écoulements en présence de parois, a pour effet une augmentation de l'anisotropie des composantes sphériques du tenseur de Reynolds et également une diminution de la tension de cisaillement : la paroi impose, en effet, un amortissement des fluctuations de vitesse dans la direction normale à la paroi qui se traduit par une redistribution de l'énergie vers les autres composantes. Dans l'expression du terme de réflexion de paroi, Gibson et Launder [33] introduisent une contribution non linéaire et une contribution linéaire sous la forme :

$$\Phi_{ij,w} = C_1' \, \frac{\widetilde{\epsilon}}{\widetilde{k}} \left( \widetilde{u_k'' u_m''} \, n_k \, n_m \, \delta_{ij} - \frac{3}{2} \, \widetilde{u_i'' u_k''} \, n_j \, n_k - \frac{3}{2} \, \widetilde{u_j'' u_k''} \, n_i \, n_k \right) \frac{\widetilde{k}^{3/2}}{C_l \, \widetilde{\epsilon} \, d} \\ + C_2' \left( \Phi_{km,2} \, n_k \, n_m \, \delta_{ij} - \frac{3}{2} \, \Phi_{ik,2} \, n_j \, n_k - \frac{3}{2} \, \Phi_{jk,2} \, n_i \, n_k \right) \frac{\widetilde{k}^{3/2}}{C_l \, \widetilde{\epsilon} \, d} \quad (\text{III.26})$$

où  $n_k$  est la composante selon  $x_k$  de la normale unitaire à la paroi, d la distance normale à la paroi,  $C_l = C_{\mu}^{3/4} / \kappa$  avec  $C_{\mu} = 0,09$  et  $\kappa$  est la constante de Von Karman et vaut 0,4187,  $C'_1 = 0,5$  et  $C'_2 = 0,3$ .

Le terme de corrélation pression-déformation s'écrit finalement :

$$\overline{p'\left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i}\right)} = -C_1 \,\overline{\rho} \,\widetilde{\epsilon} \left(\frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{\widetilde{k}} - \frac{2}{3} \,\delta_{ij}\right) - C_2 \,\overline{\rho} \left(P_{ij} - \frac{2}{3} \,P_k \,\delta_{ij}\right) + C_1' \,\frac{\widetilde{\epsilon}}{\widetilde{k}} \left(\widetilde{u_k'' u_m''} \,n_k \,n_m \,\delta_{ij} - \frac{3}{2} \,\widetilde{u_i'' u_k''} \,n_j \,n_k - \frac{3}{2} \,\widetilde{u_j'' u_k''} \,n_i \,n_k\right) \frac{\widetilde{k}^{3/2}}{C_l \,\widetilde{\epsilon} \,d} + C_2' \left(\Phi_{km,2} \,n_k \,n_m \,\delta_{ij} - \frac{3}{2} \,\Phi_{ik,2} \,n_j \,n_k - \frac{3}{2} \,\Phi_{jk,2} \,n_i \,n_k\right) \frac{\widetilde{k}^{3/2}}{C_l \,\widetilde{\epsilon} \,d}$$
(III.27)

Compte tenu des diverses modélisations adoptées pour permettre la fermeture de l'équation de transport de  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i \, u''_j}$ , cette dernière peut finalement se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i''\,u_j''}}{\partial \,t} + \frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_k}\,\widetilde{u_i''\,u_j''}}{\partial \,x_k} = \overline{\rho}\,D_{ij} + \overline{\rho}\,P_{ij} - \frac{2}{3}\,\overline{\rho}\,\widetilde{\epsilon}\,\delta_{ij} - C_1\,\overline{\rho}\,\widetilde{\epsilon}\left(\frac{\widetilde{u_i''\,u_j''}}{\widetilde{k}} - \frac{2}{3}\,\delta_{ij}\right) \\
- C_2\,\overline{\rho}\,\left(P_{ij} - \frac{2}{3}\,P_k\,\delta_{ij}\right) + C_1'\,\frac{\widetilde{\epsilon}}{\widetilde{k}}\left(\widetilde{u_k''\,u_m''}\,n_k\,n_m\,\delta_{ij} - \frac{3}{2}\,\widetilde{u_i''\,u_k''}\,n_j\,n_k - \frac{3}{2}\,\widetilde{u_j''\,u_k''}\,n_i\,n_k\right)\frac{\widetilde{k}^{3/2}}{C_l\,\widetilde{\epsilon}\,d} \\
+ C_2'\left(\Phi_{km,2}\,n_k\,n_m\,\delta_{ij} - \frac{3}{2}\,\Phi_{ik,2}\,n_j\,n_k - \frac{3}{2}\,\Phi_{jk,2}\,n_i\,n_k\right)\frac{\widetilde{k}^{3/2}}{C_l\,\widetilde{\epsilon}\,d} \quad (\text{III.28})$$

avec les valeurs de constantes définies précédemment.

#### III.4.2.5 Modélisation de l'énergie cinétique turbulente $\tilde{k}$

Une équation de transport pour l'énergie cinétique turbulente k est obtenue à partir de celles des contraintes de Reynolds en contractant les indices i et j:

$$\frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{k}}{\partial \,t} + \frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{k}\,\widetilde{u}_l}{\partial \,x_l} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial \,x_l} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \,\widetilde{k}}{\partial \,x_l} \right]}_{(i)} \underbrace{+ \frac{1}{2} \,\overline{\rho}\,P_{ii}}_{(ii)} \underbrace{-\overline{\rho}\,\widetilde{\epsilon}}_{(iii)}$$
(III.29)

 $\begin{array}{l} (i): \text{Diffusion de } \overline{\rho} \, \widetilde{k} \\ (ii): \text{Production de } \overline{\rho} \, \widetilde{k} \\ (iii): \text{Dissipation de } \overline{\rho} \, \widetilde{k} \end{array}$ 

où  $\overline{\rho} P_{ii}$  est le terme de production d'énergie cinétique turbulente défini précédemment et les constantes possèdent les valeurs :  $\sigma_k = 0,82$  et  $C_{\mu} = 0,09$ 

Même si dans la littérature, on néglige souvent, pour les écoulements à grand nombre de Reynolds, les contributions dans les termes de diffusion de  $\tilde{k}$  et  $\tilde{\epsilon}$  dues à la visco-sité moléculaire, dans notre étude, nous avons préféré les conserver dans chacune de ces équations.

Le modèle aux tensions de Reynolds permet la fermeture des équations de Navier-Stokes en moyenne de Reynolds et cela **en résolvant les équations de transport des tensions de Reynolds** (équation III.28) ainsi qu'**une équation pour le taux de**  dissipation (équation III.20). De plus, dans FLUENT, une équation de transport pour l'énergie cinétique turbulente (équation III.29) est résolue afin d'obtenir les conditions aux limites pour les tensions de Reynolds. Autrement dit, dans ce modèle, huit équations de transport sont traitées.

L'utilisation de ce modèle constitue une des originalités de ce travail et distingue notre modélisation des autres puisque dans la majorité des études, le modèle mis en œuvre est le modèle  $(k, \epsilon)$  ou son dérivé, le modèle  $(k, \epsilon)$  réalisable qui permet d'aboutir à des prédictions plus fiables (voir Annexe A).

Les valeurs des constantes du modèle aux tensions de Reynolds que l'on utilise pour notre étude sont regroupées dans le tableau suivant :

$C_{\mu}$	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	$C_1$	$C_2$	$C'_1$	$C'_2$	$\sigma_k$	$\sigma_{\epsilon}$
0,09	1,44	1,92	1,8	0, 6	0,5	0,3	0,82	1

TAB. III.2 : Constantes du modèle RSM

A la différence de l'approche adoptée ici pour fermer les équations du tenseur de Reynolds, il est à noter que Vallet avait choisi de considérer le modèle A.S.M. et l'avait adapté au cas de son écoulement dans lequel existaient de forts gradients de masse volumique. La mise en œuvre de ce modèle n'est pas exposée ici (pour plus de détail, il convient de se référer à [100]). Ce modèle constitue, en effet, une solution intermédiaire à la fermeture des équations.

Reste maintenant à modéliser le flux turbulent des fluctuations de fraction massique,  $\overline{\rho} \widetilde{u''_i Y''}$ , pour fermer le modèle considéré muni d'un modèle de turbulence.

# III.5 Fermeture du flux turbulent des fluctuations de fraction massique $\overline{\rho} u_j'' Y''$

Pour modéliser ce terme, plusieurs approches sont possibles. On peut se contenter d'utiliser une **loi de type premier gradient** ou bien faire comme l'ont proposé Vallet et Borghi considérer une **équation de transport** pour calculer ce terme.

#### III.5.1 Modélisation de type premier gradient

Par analogie à la loi de Fick, l'expression du flux de diffusion turbulent de  $\widetilde{Y}$  est couramment appochée par une loi de type premier gradient :

$$\overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' \, Y''} = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \, \frac{\partial \, Y}{\partial \, x_i} \tag{III.30}$$

où  $Sc_t$  est le nombre de Schmidt turbulent et la viscosité turbulente  $\mu_t$  est donnée par l'expression III.10. Cette formulation classique suppose que le flux turbulent de  $\tilde{Y}$  n'est fonction que du gradient moyen de  $\tilde{Y}$ . C'est une fermeture de ce type que l'on a choisi d'adopter dans cette étude. Cependant, le problème de la modélisation précédente est qu'elle ne prend pas en compte les effets de glissement et les variations de masse volumique. C'est pourquoi Vallet et Borghi ont préféré résoudre une équation de transport pour  $\overline{\rho} \widetilde{u''_j Y''}$ . Même si cette seconde alternative n'a pas été retenue, il est intéressant de la détailler car elle constitue une voie d'amélioration possible à notre travail.

Demoulin [27], quant à lui, propose une nouvelle formulation pour le flux turbulent des fluctuations de fraction massique,  $\overline{\rho} u_i'' Y''$ . Sa démarche est la suivante : il suggère que le nombre de Schmidt turbulent  $Sc_t$  intervenant lorsqu'une modélisation de type premier gradient est retenue pour le terme  $\overline{\rho} u_i'' Y''$  (voir équation III.30) est fonction du rapport des masses volumiques du liquide et du gaz,  $\frac{\rho_l}{\rho_g}$ . Il s'inspire de la modélisation de Silvani [89] dans laquelle l'inverse du nombre de Schmidt turbulent est supposé varier comme la masse volumique à l'intérieur d'une couche de mélange suivant la relation :

$$\frac{1}{Sc_t} \propto 1 + \overline{\rho} \left( \frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_l} \right) \tag{III.31}$$

En se référant aux travaux de Launder [49] et ceux de Lumley [56] sur les écoulements stratifiés à masse volumique variable avec effet de gravité, qui ont conduit à l'introduction d'un terme additionnel dans la modélisation du terme  $p' \frac{\partial Y''}{\partial x_i}$ , Demoulin propose une nouvelle modélisation :

$$\overline{p' \frac{\partial Y''}{\partial x_i}} = \ldots + C_{yr} \,\overline{\rho} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g}\right) \overline{\rho} \,\widetilde{k} \,\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_i}$$

où  $C_{yr}$  est une constante. Au lieu d'une fermeture du second ordre, il est possible d'adopter une expression plus simple pour le flux  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i} \, Y''$  correspondant à une fermeture du premier ordre seulement. Pour cela, les termes de destruction, de production classique par gradient moyen de la fraction massique ainsi que le terme supplémentaire proposé par Demoulin (relation III.32) sont supposés prépondérants (et se compensent) dans l'équation de transport III.37 du flux turbulent  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i} \, Y''$ . Ces considérations permettent d'aboutir à l'expression suivante pour le flux de diffusion de la fraction massique :

$$-\overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' Y''} = \left[ \underbrace{\frac{\mu_t}{Sc_t}}_{(i)} + \underbrace{\frac{C_y \, \widetilde{k}^2}{\widetilde{\epsilon}} \, \overline{\rho}^2 \left(\frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_l}\right)}_{(ii)} \right] \, \frac{\partial \, \widetilde{Y}}{\partial \, x_i} \tag{III.32}$$

où  $C_y$  est une constante. Dans cette nouvelle écriture, le premier terme (i) n'est autre que celui obtenu classiquement pour une modélisation de type gradient, le second (ii)correspond à la correction à apporter afin de tenir compte du fort rapport de masses volumiques. Cette nouvelle formulation présente un avantage considérable, celui de rester dans le cadre du modèle  $(\tilde{k}, \tilde{\epsilon})$  avec un terme de diffusion modifié pour l'équation de transport de la fraction massique liquide  $\tilde{k}$ . De plus, cela ne génère pas de difficulté du point de vue numérique et n'alourdit que très peu le calcul.

### III.5.2 Equation de transport pour $\overline{\rho} \widetilde{u''_i Y''}$

Nous allons exposer ici comment est obtenue cette équation de transport. On part de l'équation de conservation de la quantité de mouvement instantanée III.2, on la multiplie

par la fraction massique liquide Y. De même, on multiplie l'équation de conservation de la fraction massique instantanée III.2 par  $u_i$ . On ajoute ensuite terme à terme les deux équations précédentes et on applique l'opérateur moyenne; en supposant les fluctuations du gradient de vitesse et de la fraction massique liquide totalement décorrélées, on obtient alors l'équation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \overline{\rho} \, \widetilde{u_i} \, \widetilde{Y} + \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' Y''} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho} \, \widetilde{u_i} \, \widetilde{u_j} \, \widetilde{Y} + \overline{\rho} \, \widetilde{u_j} \, \widetilde{u_i'' Y''} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' u_j''} \, \widetilde{Y} + \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' Y''} \, \widetilde{u_i} + \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' u_j'' Y''} \right) - \frac{\partial \overline{pY}}{\partial x_i} + \overline{p} \, \frac{\partial \overline{Y}}{\partial x_i} \quad (\text{III.33})$$

On procède de manière analogue pour l'équation de quantité de mouvement moyennée III.6, à savoir on la multiplie par  $\tilde{Y}$  et on lui ajoute l'équation de conservation de la fraction massique moyennée III.8 multipliée par  $\tilde{u}_i$  on aboutit alors à l'équation :

$$\frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i}\,\widetilde{Y}}{\partial \,t} + \frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i}\,\widetilde{u_j}\,\widetilde{Y}}{\partial \,x_j} = -\frac{\partial \,\overline{p}\,\widetilde{Y}}{\partial \,x_i} + \overline{p}\,\frac{\partial \,\widetilde{Y}}{\partial \,x_i} - \frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i''\,u_j''}}{\partial \,x_j}\,\widetilde{Y} - \frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i''\,Y''}}{\partial \,x_j}\,\widetilde{u_i} \quad \text{(III.34)}$$

En soustrayant l'équation III.34 à l'équation III.33, l'équation de transport pour  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i Y''}$  s'écrit finalement :

$$\frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i''\,Y''}}{\partial \,t} + \frac{\partial \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i''\,Y''}\,\widetilde{u_j}}{\partial \,x_j} = -\frac{\partial}{\partial \,x_j} \left(\overline{\rho}\,\widetilde{u_i''\,u_j''\,Y''} + \overline{p'\,Y''}\,\delta_{ij}\right) - \overline{\rho}\,\widetilde{u_i''\,u_j''}\,\frac{\partial \,\widetilde{Y}}{\partial \,x_j} \\ - \,\overline{\rho}\,\widetilde{u_i''\,Y''}\,\frac{\partial \,\widetilde{u_i}}{\partial \,x_j} - \overline{Y''}\,\frac{\partial \,\overline{p}}{\partial \,x_i} + \overline{p'\,\frac{\partial \,Y''}{\partial \,x_i}} \quad (\text{III.35})$$

Par analogie avec le terme de corrélation de pression-vitesse fluctuante  $(\Phi_{ij})$  présent dans l'équation de transport des tensions de Reynolds (cf. équation III.27), Bailly *et al* [8] modélisent la corrélation  $\overline{p' \frac{\partial Y''}{\partial x_i}}$  de la façon suivante :

$$\overline{p'\frac{\partial Y''}{\partial x_i}} = -\frac{a_1}{\tau_t}\,\overline{\rho}\,\widetilde{u''_i\,Y''} + \gamma\,\overline{\rho}\,\widetilde{u''_j\,Y''}\,\frac{\partial\,\widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \gamma'\,\overline{Y''}\,\frac{\partial\,\overline{p}}{\partial x_i} \tag{III.36}$$

où  $a_1 = 3, \ \gamma = 0, 5, \ \gamma' = 0, 5$  et  $\tau_t$  un temps caractéristique de la turbulence :  $\tau_t = \frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}}$ .

L'équation III.35 peut donc s'écrire comme suit :

$$\frac{\partial \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' Y''}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' Y''} \, \widetilde{u_j}}{\partial x_j} = \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' u_j'' Y''} + \overline{p' Y''} \, \delta_{ij} \right)}_{(i)}}_{(i)} \\
\underbrace{-\overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' u_j''} \, \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_j} - (1 - \gamma) \, \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' Y''} \, \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} - (1 - \gamma') \, \overline{Y''} \, \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}}_{(ii)} \underbrace{-\frac{a_1}{\tau_t} \, \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' Y''}}_{(iii)} \quad (\text{III.37})$$

- (i): Diffusion par les fluctuations de vitesse et de pression
- (ii): Production par les gradients moyens de fraction massique, de vitesse et de pression
- (iii) : Destruction de  $\overline{\rho} \widetilde{u_i'' Y''}$

Vallet et Borghi ont ensuite supposé et vérifié que les termes dominants de cette équation de transport étaient les termes de production et de destruction (*i.e.* ces termes sont compensatoires), ce qui permet d'obtenir une relation algébrique pour  $\overline{\rho} \, \widetilde{u''_i} \, Y''$ :

$$\overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' Y''} = -\frac{\tau_t}{a_1} \left( \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' u_j''} \, \frac{\partial \, \widetilde{Y}}{\partial \, x_j} + (1 - \gamma) \, \overline{\rho} \, \widetilde{u_i'' Y''} \, \frac{\partial \, \widetilde{u_i}}{\partial \, x_j} + (1 - \gamma') \, \overline{Y''} \, \frac{\partial \, \overline{p}}{\partial \, x_i} \right) \quad \text{(III.38)}$$

Borghi a montré qu'il est possible d'obtenir l'équation III.39 précédente en suivant un raisonnement différent. Il suffit de remarquer que :

$$-\overline{Y''}\,\frac{\partial\,\overline{p}}{\partial\,x_i} = -\frac{\partial\,\overline{p}\,\overline{Y''}}{\partial\,x_i} + \overline{p}\,\frac{\partial\,\overline{Y''}}{\partial\,x_i}$$

Les termes relatifs à la pression de l'équation III.35 se mettent alors sous la forme suivante :

$$\left(-\frac{\partial \overline{p'Y''}}{\partial x_j}\,\delta_{ij} - \frac{\partial \overline{p}\,\overline{Y''}}{\partial x_i}\right) + \left(\overline{p}\,\frac{\partial \overline{Y''}}{\partial x_i} + \overline{p'\,\frac{\partial Y''}{\partial x_i}}\right) = -\frac{\partial \overline{p\,Y''}}{\partial x_i} + \overline{p\,\frac{\partial Y''}{\partial x_i}}$$

Le premier terme du second membre de l'équation correspond à un terme de diffusion ; le second peut être assimilé au terme  $p' \frac{\partial Y''}{\partial x_i}$ . En considérant de nouveau l'équation III.36, et en supposant l'égalité des termes de

En considérant de nouveau l'équation III.36, et en supposant l'égalité des termes de production et de destruction de  $\overline{\rho} \widetilde{u''_i} Y''$ , on retrouve bien la relation III.39.

Il faut néanmoins rappeler que, dans l'équation III.35, les termes en  $u_i''$  et Y'' sont décorrélés aux petites échelles. Si cette hypothèse se révélait éronnée, il suffirait de prendre en compte ces termes dans l'équation III.36.

Enfin,  $\overline{Y''}$  possède une expression similaire à celle de  $\overline{u''_i}$ :

$$\overline{Y''} = \overline{\rho} \, \widetilde{Y} \left( 1 - \widetilde{Y} \right) \left( \frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \tag{III.39}$$

On s'est efforcé de choisir le plus judicieusement possible les schémas de fermeture pour qu'ils réintroduisent les informations perdues dans un nouveau système, fermé celui-ci, que l'on pourra résoudre numériquement.

## Chapitre IV

# Modélisation de la taille des fragments liquides

A ce stade, le modèle présenté précedemment permet de connaître la fraction massique du liquide. Cependant, cette donnée n'est pas suffisante à elle seule pour caractériser le spray. Le calcul d'une taille caractéristique de gouttes comme, par exemple, un diamètre moyen de Sauter est indispensable pour parvenir à une modélisation complète du phénomène d'atomisation.

#### IV.1 Introduction

Comme il a déjà été mentionné précédemment, un parallèle entre le rôle de la viscosité en turbulence et celui de la capillarité en régime d'atomisation est effectué. Par analogie avec le nombre de Reynolds turbulent  $Re_t = \sqrt{\tilde{k} l_t}/v$ , on peut définir en chaque point un nombre de Weber turbulent  $We_t = \rho_g \tilde{k} l_t / \sigma$ , où  $l_t$  est l'échelle des grandes stuctures,  $\tilde{k}$ l'énergie cinétique turbulente, v la viscosité,  $\rho_q$  la masse volumique du gaz et  $\sigma$  la tension superficielle. De même que, lorsque  $Re_t$  est très supérieur à 1, la viscosité ne joue qu'à l'échelle des petites structures turbulentes, quand  $We_t$  est très supérieur à 1, la capillarité intervient uniquement au niveau des gouttes liquides. Autrement dit, les caractéristiques des petites échelles, la taille moyenne des fragments liquides issus du jet sont liées à la tension superficielle. Cette hypothèse de base n'est rien d'autre que la généralisation des hypothèses de Kolmogorov pour la turbulence. Par conséquent, par analogie avec le nombre de Reynolds basé sur les échelles de Kolmogorov d'ordre 1, on peut créer un nombre de Weber, aux échelles de la goutte, d'ordre 1, pour lequel les effets turbulents et capillaires sont du même ordre de manière à obtenir une taille caractéristique pour les fragments liquides. Ce nombre que l'on peut qualifier de nombre de Weber d'atomisation,  $We_a$ , est défini par :

$$We_a = \rho_g \, \frac{\widetilde{k} \, r}{\sigma} \approx 1$$
 (IV.1)

où  $\rho_g$  est la masse volumique du gaz,  $\tilde{k}$  l'énergie cinétique turbulente, et r un « rayon d'équilibre » pour les fragments liquides. A partir de la relation IV.1, il serait possible d'établir un modèle algébrique global qui permettrait de définir la taille d'un fragment

liquide en fonction de l'énergie cinétique turbulente qui l'entoure. Cependant, cela ne constituerait qu'une méthode très grossière ne prenant pas en compte les phénomènes physiques d'atomisation et de coalescence. De plus, l'équilibre n'est pas atteint instantanément, mais avec un certain délai. C'est pour cette raison qu'on préfère utiliser une équation de transport pour la surface liquide moyenne par unité de volume,  $\overline{\Sigma}$ . Cette équation, couplée à celle de la fraction massique moyenne de la phase dispersée  $\widetilde{Y}$ , permet de calculer, en tout point de l'écoulement, une taille moyenne de gouttes. En effet, on voit d'ores et déjà que, si l'on considère n gouttes sphériques de rayon r par unité de volume, on a alors :

$$\begin{cases} \overline{\tau} = \frac{\overline{\rho}\,\widetilde{Y}}{\rho_l} = n\,\frac{4}{3}\,\pi\,r^3\\ \overline{\Sigma} = n\,4\,\pi\,r^2 \end{cases} \Rightarrow r = \frac{3\,\overline{\rho}\,\widetilde{Y}}{\rho_l\,\overline{\Sigma}} \tag{IV.2}$$

Et

$$n = \frac{\rho_l^2 \,\overline{\Sigma}^3}{36 \,\pi \,\overline{\rho}^2 \,\widetilde{Y}^2} \tag{IV.3}$$

où  $\overline{\tau}$  est la fraction volumique moyenne du liquide et  $\rho_l$  la masse volumique du liquide.

#### IV.2 Equation de la surface liquide moyenne volumique

L'approche adoptée est directement inspirée des modèles d'évolution de fronts de flamme en combustion turbulente dans lesquels la variable  $\overline{\Sigma}$  correspond à la surface de l'interface entre le carburant et les gaz brûlés. Il est intéressant de rappeler que ce type d'équation pour la surface de flamme a d'abord été établi par Marble et Broadwell [59] pour les flammes de diffusion turbulente en s'appuyant sur des considérations expérimentales. Plus récemment, Mantel et Borghi [58] ainsi que Trouvé [96] sont parvenus, à l'aide d'une approche plus rigoureuse, à obtenir une formulation exacte de cette équation. L'idée originale d'adapter un modèle de surface de flamme au problème de l'atomisation d'un jet liquide revient à Vallet et Borghi [100].

La variable transportée est la surface moyenne des gouttes liquides par unité de volume, elle s'exprime en  $m^{-1}$  et l'équation qui lui est associée s'écrit :

$$\overline{\rho}\frac{D\,\overline{\Sigma}/\overline{\rho}}{D\,t} = \frac{\partial\,\overline{\Sigma}}{\partial\,t} + \frac{\partial\,\overline{\Sigma}\,\widetilde{u}_i}{\partial\,x_i} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial\,x_i}\left(\frac{\nu_t}{Sc_{\Sigma}}\,\frac{\partial\,\overline{\Sigma}}{\partial\,x_i}\right)}_{(i)} \underbrace{+\left(a+A\right)\overline{\Sigma}}_{(ii)} \underbrace{-V_a\,\overline{\Sigma}^2}_{(iii)} \tag{IV.4}$$

où  $\overline{\rho}$  est la masse volumique moyenne du mélange,  $\nu_t$  le coefficient de viscosité turbulente,  $Sc_{\Sigma}$  une constante et  $(a + A)\overline{\Sigma} - V_a\overline{\Sigma}^2$  le terme source de l'équation.

(i) Diffusion

(ii) Production de surface

(*ii*) Destruction

Concernant le terme de diffusion, on utilise l'hypothèse classique selon laquelle :

$$\frac{\nu_t}{Sc_{\Sigma}} \frac{\partial \overline{\Sigma}}{\partial x_i} = \frac{\mu_t}{Sc_{\Sigma}} \frac{\partial \left(\Sigma/\overline{\rho}\right)}{\partial x_i} \tag{IV.5}$$

où la constante  $Sc_{\Sigma}$  est telle que la valeur du gradient  $\left(\frac{\mu_t}{Sc_{\Sigma}} \frac{\partial \overline{\Sigma}/\overline{\rho}}{\partial x_i}\right)$  est très similaire à celle de  $-\overline{\rho} \widetilde{u''_i} Y''$  dans la région principale d'atomisation.

Dans un premier temps, nous allons définir les termes de production de l'équation de la surface liquide moyenne volumique. Ces derniers « contribuent » à fragmenter le liquide en gouttelettes. A quantité de masse liquide égale, augmenter la surface totale des gouttes revient, en effet, à augmenter le nombre de gouttes. Ils sont de deux sortes et correspondent à des phénomènes physiques bien distincts.

#### IV.2.1 Terme de production de surface $a \Sigma$

Au niveau des petites échelles, l'interface liquide/gaz est étirée par la turbulence. Le terme de production  $a \overline{\Sigma}$  représente ce phénomène; a possède la dimension de l'inverse d'un temps  $(s^{-1})$ .

On choisit le temps caractéristique de la turbulence ou temps de retournement des grands tourbillons :  $\tau_t = \frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}}$ .

La contribution correspondante sera notée  $a_{turb}$  et aura pour expression :

$$a_{turb} = \alpha_1 \frac{\widetilde{\epsilon}}{\widetilde{k}} \tag{IV.6}$$

avec  $\alpha_1$  une constante de modélisation.

D'autre part, on peut supposer que le phénomène de collision peut également conduire au fractionnement des gouttes et par conséquent, à la création de surface. Afin de modéliser le terme de production due à la rupture après collision  $a_{coll} \overline{\Sigma}$ , il faut d'abord quantifier les effets de collision.

On considère premièrement un temps caractéristique de collision. Vallet [102] propose de définir ce temps de collision comme le rapport de la longueur de collision sur une vitesse caractéristique de collision :

$$\tau_{coll} = \frac{l_{coll}}{\Delta v_{coll}} \tag{IV.7}$$

La longueur caractéristique de collision  $l_{coll}$  n'est autre que la distance moyenne entre les gouttes. Elle est donnée par :

$$l_{coll} = n^{-1/3} \tag{IV.8}$$

Où, le nombre de gouttes par unité de volume n, sous l'hypothèse de gouttes sphériques, est donné par la relation IV.3. La vitesse de collision  $\Delta v_{coll}$  est la vitesse relative entre deux gouttes entrant en collision. La turbulence aux petites échelles étant responsable de la collision, la relation de Kolmogorov est considérée :

$$\Delta v_{coll} = \left(\tilde{\epsilon} \, l_{coll}\right)^{1/3} \tag{IV.9}$$

Il s'ensuit :

$$a_{coll} \propto \frac{\Delta v_{coll}}{l_{coll}} = \frac{\left(\tilde{\epsilon} n^{-1/3}\right)^{1/3}}{n^{-1/3}} = \tilde{\epsilon}^{1/3} n^{2/9}$$

- 10

Finalement, en introduisant l'échelle intégrale de turbulence  $l_t$  et en posant une constante de proportionnalité entre le terme  $a_{coll}$  et l'inverse du temps  $\tau_{coll}$ , on arrive à l'expression suivante pour la contribution relative aux collisions  $a_{coll}$ :

$$a_{coll} = \frac{\alpha_2}{\left(36\,\pi\right)^{2/9}} \left(l_t\,\overline{\Sigma}\right)^{2/3} \left(\frac{\rho_l}{\overline{\rho}}\right)^{4/9} \frac{\widetilde{\epsilon}}{\widetilde{k}} \frac{1}{\widetilde{Y}^{4/9}} \tag{IV.10}$$

où  $\alpha_2$  une constante et :

$$l_t = \frac{C_{\mu}^{3/4} \tilde{k}^{3/2}}{\tilde{\epsilon}} \tag{IV.11}$$

avec  $C_{\mu} = 0,09$ . L'expression IV.10 peut s'écrire également :

$$a_{coll} = \frac{\alpha_2 C_{\mu}^{1/2}}{(36 \pi)^{2/9}} \,\widetilde{\epsilon}^{1/3} \,\rho_l^{4/9} \,\overline{\rho}^{-4/9} \,\widetilde{Y}^{-4/9} \,\overline{\Sigma}^{2/3} \tag{IV.12}$$

Afin d'assurer une meilleure description de la physique de l'écoulement, nous avons choisi de prendre en compte à la fois la turbulence et les collisions au travers de l'expression du terme a. Pour cela, nous avons considéré une expression qui fait intervenir la somme des deux expressions  $a_{turb}$  et  $a_{coll}$ :

$$a = a_{turb} + a_{coll} = \alpha_1 \,\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} + \frac{\alpha_2 \, C_{\mu}^{1/2}}{(36 \, \pi)^{2/9}} \,\tilde{\epsilon}^{1/3} \,\rho_l^{4/9} \,\overline{\rho}^{-4/9} \,\widetilde{Y}^{-4/9} \,\overline{\Sigma}^{2/3} \tag{IV.13}$$

#### IV.2.2 Terme de production de surface $A \overline{\Sigma}$

A grande échelle, à l'échelle de l'écoulement moyen, la surface liquide est étirée par les gradients de la vitesse moyenne de l'écoulement. Le terme A traduit ce mécanisme, il possède la dimension de l'inverse d'un temps  $(s^{-1})$  et correspond à l'instabilité de Kelvin-Helmholtz qui se développe à l'interface de deux écoulements de vitesses différentes. Vallet et Borghi prennent pour ce terme l'inverse du temps caractéristique du terme de production de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente. On a donc l'expression suivante :

$$A = \frac{P_k}{\tilde{k}} \tag{IV.14}$$

où  $P_k$  est défini par l'équation III.25. Soit,

$$A = -\alpha_0 \frac{\widetilde{u''_i u''_j}}{\widetilde{k}} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j}$$
(IV.15)

où  $\alpha_0$  est une constante positive.

## IV.2.3 Terme de destruction de surface $V_a \overline{\Sigma}^2$

Ce terme de destruction de surface est lié à la **coalescence** des gouttes due à la turbulence. L'agitation du fluide augmente, en effet, le nombre de **collisions** entre gouttelettes et par conséquent, accroît les probabilités de coalescence. Il contribue à détruire de la surface liquide par unité de volume du mélange pour ramener les gouttes à leur taille d'équilibre.

Pour déterminer ce terme, il suffit de considérer l'équation de transport de  $\Sigma$  à **l'équilibre** et sans gradient de vitesse (A = 0), loin de la buse, où l'on suppose que la production est égale à la destruction. On a alors :

$$a \overline{\Sigma_{eq}} = V_a \overline{\Sigma_{eq}}^2 \Rightarrow V_a = \frac{a}{\overline{\Sigma_{eq}}}$$
 (IV.16)

où  $\Sigma_{eq}$  est la valeur de  $\Sigma$  à l'équilibre.

On peut exprimer  $\Sigma_{eq}$  en se réferrant à l'équation IV.2 en considérant des gouttes sphériques de rayon  $r_{eq}$  :

$$\overline{\Sigma}_{eq} = \frac{3\,\overline{\rho}\,\widetilde{Y}}{\rho_l\,r_{eq}}\tag{IV.17}$$

Finalement, on arrive à l'expression :

$$V_a = \frac{a \rho_l r_{eq}}{3 \,\overline{\rho} \,\widetilde{Y}} \tag{IV.18}$$

Comme on vient de le voir, il y a génération de gouttes à partir des collisions et destruction de gouttes par coalescence. Par conséquent, afin de trouver l'expression du rayon moyen d'équilibre tel que l'on ait autant de collision que de coalescence, on considère deux gouttes de masse  $m_1$  et  $m_2$ . On se place dans un repère situé au centre de masse O du système possédant une vitesse  $\Delta v$ , qui correspond à la vitesse relative des deux gouttes (voir Figure IV.1) :



FIG. IV.1 : Principe de collision

Les deux gouttes entrent en collision provoquant la cassure de la goutte de masse  $m_2$  en deux gouttes de taille identique. Le centre de mase du système possède alors une vitesse relative nulle, ce qui signifie que toute l'énergie cinétique relative a servi à fractionner la goutte de masse  $m_2$  (situation d'équilibre). Pour permettre de simplifier le problème, les gouttes de masse  $m_1$  et  $m_2$  sont supposées identiques et toute l'énergie cinétique est supposée transformée en énergie surfacique lors de la collision (hypothèse d'un choc totalement inélastique).

L'équation de conservation de l'énergie totale du système peut alors s'écrire ainsi :

$$KE_{initial} + SE_{initial} = SE_{final} \tag{IV.19}$$

où KE et SE symbolisent respectivement l'énergie cinétique et l'énergie de surface du système.

Ce qui entraîne ensuite :

$$\rho_l \frac{4}{3} \pi r_{initial}^3 \left( \Delta v_{coll} \right)^2 + \sigma 4 \pi r_{initial}^2 = 2 \sigma 4 \pi r_{final}^2$$

Dans cette expression,  $r_{initial}$  correspond au rayon des gouttes de masse  $m_1$  et  $m_2$  avant collision et  $r_{final}$  au rayon des deux gouttes générées suite au fractionnement de la goutte de masse  $m_2$ . Enfin,  $\rho_l$  représente la masse volumique du liquide et  $\sigma$  sa tension superficielle.

En outre, lors du processus de collision, il faut considérer la conservation de la masse :

$$\rho_l \,\frac{4}{3} \,\pi \,r_{initial}^3 = 2 \,\rho_l \,\frac{4}{3} \,\pi \,r_{final}^3 \Rightarrow r_{final} = 2^{-1/3} \,r_{initial}$$

L'équation IV.19 s'écrit donc :

$$\rho_l \frac{4}{3} \pi r_{initial}^3 \left( \Delta v_{coll} \right)^2 = \sigma 4 \pi r_{initial}^2 \left( 2^{1/3} - 1 \right)$$
(IV.20)

Le rayon  $r_{initial}$  présent dans cette équation n'est en réalité rien d'autre que le rayon moyen d'équilibre  $r_{eq}$  étant donné qu'en moyenne, les grosses gouttes se fractionnent jusqu'à atteindre ce rayon et que les petites gouttes, quant à elles, ne subissent pas de collision mais, au contraire, coalescent.

Partant des expressions de  $l_{coll}$  (équation IV.8) et  $\Delta v_{coll}$  (équation IV.9) utilisées pour déterminer le terme a, on obtient finalement :

$$r_{eq} = C \, \frac{\sigma^{3/5} \, l_t^{2/5}}{\tilde{k}^{3/5}} \, \frac{\left(\overline{\rho} \, \widetilde{Y}\right)^{2/15}}{\rho_l^{11/15}} \tag{IV.21}$$

dans laquelle on rappelle que  $l_t = \frac{C_{\mu}^{3/4} \tilde{k}^{3/2}}{\tilde{\epsilon}}$  et C est une constante. Ce qui s'écrit encore :

$$r_{eq} = C \frac{\sigma^{3/5} C_{\mu}^{3/10} \left(\overline{\rho} \, \widetilde{Y}\right)^{2/15}}{\widetilde{\epsilon}^{2/5} \, \rho_l^{11/15}} \tag{IV.22}$$

En injectant la relation IV.22 précédente dans l'expression IV.18, le terme  $V_a$  peut fina-

lement s'écrire sous la forme suivante :

$$V_a = a C \frac{\rho_l^{4/15} \sigma^{3/5} C_\mu^{3/10} \left(\overline{\rho} \, \widetilde{Y}\right)^{-13/15}}{3 \, \widetilde{\epsilon}^{2/5}} \tag{IV.23}$$

Comme il a été dit précédemment, dans le régime d'atomisation, la tension de surface a tendance à s'opposer au fractionnement des gouttes. Par conséquent, il semble logique que cette dernière apparaisse dans l'expression du terme de destruction de la densité de surface liquide moyenne.

Par ailleurs, il est important de souligner que le terme de destruction de l'équation de la surface liquide moyenne volumique est en  $\overline{\Sigma}^2$ , et non en  $\overline{\Sigma}$ , comme le terme de production et cela afin d'éviter un accroissement ou une destruction infini de la surface. Une autre justification possible est que ce terme de destruction peut être interprété physiquement comme étant principalement due à la coalescence d'interfaces proches, en raison de leur interaction ; par conséquent, la probabilité d'avoir une interface dans un volume donné est fonction de  $\overline{\Sigma}$ , et la probabilité qu'il y ait une interaction entre deux interfaces dans ce même volume est proportionnelle à  $\overline{\Sigma}^2$ .

Une étude plus précise de l'équation pour la variable  $\overline{\Sigma}$  a été réalisée par d'autres auteurs (Lhuillier et Morel [52]), mais n'a pas abouti à une équation utilisable seulement en fonction des grandeurs moyennes de l'écoulement, les seules qu'il est possible de calculer ici.

#### IV.3 Développement de nouvelles expressions

Pour la modélisation du terme A (cf. équation IV.4), il est également possible de considérer une expression où n'intervient pas la quantité  $\widetilde{u''_i u''_j}/\widetilde{k}$ , mais seulement **le tenseur gradient de vitesse moyenne** et plus précisément **sa norme**. Cette norme se définit ainsi : on symétrise le tenseur gradient de vitesse, on lui retranche sa trace et on obtient un tenseur symétrique noté  $G_{ij}$ , et la norme en question est égale à la racine carrée des  $G_{ij} G_{ij}$ . Nous avons considéré par la suite différentes expressions dérivées de la formule précédente :

$$A = \frac{\alpha'_0}{2} \left\| \frac{\partial \,\widetilde{u}_i}{\partial \,x_j} + \frac{\partial \,\widetilde{u}_j}{\partial \,x_i} - \frac{2}{3} \,\delta_{ij} \frac{\partial \,\widetilde{u}_l}{\partial \,x_l} \right\| \tag{IV.24}$$

ou

$$A = \frac{\alpha'_0}{2} \left\| \frac{\partial \,\widetilde{u_i}}{\partial \,x_j} + \frac{\partial \,\widetilde{u_j}}{\partial \,x_i} + \left( \alpha'_0 - \frac{2}{3} \right) \delta_{ij} \frac{\partial \,\widetilde{u_l}}{\partial \,x_l} \right\| \tag{IV.25}$$

ou encore

$$A = \frac{\alpha'_0}{2} \left\| \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \,\delta_{ij} \frac{\partial \widetilde{u}_l}{\partial x_l} \right\| + \alpha'_0 \,\frac{\partial \widetilde{u}_l}{\partial x_l} \tag{IV.26}$$

Où  $\alpha_0'$  est une constante de modélisation prise égale à 0,1.

D'une manière générale, l'ensemble des constantes intervenant dans la modélisation pour

ce chapitre est répertorié dans le tableau suivant :

	$\alpha_0$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha'_0$	C	
	1	0,5	1	0, 1	1, 2	
Б	<b>TX</b> 7	1.0		. 1	1/1	. ,

TAB. IV.1 : Constantes de modélisation

En résumé, l'équation de transport pour l'aire de l'interface liquide/gaz exprime la production ou la destruction de surface. La production est fonction, d'une part, à grande échelle du gradient de vitesse moyenne et d'autre part, à petite échelle, de la turbulence. La destruction, quant à elle, tient compte de la tension superficielle qui s'oppose à l'étirement de la surface. L'équation pour la fraction massique liquide et celle pour l'aire de l'interface, couplées à l'équation de quantité de mouvement et à celles de la turbulence, permettent de décrire l'évolution spatiale des rayons et des vitesses de gouttes produites en sortie de buse.

# Troisième partie

Comportement du modèle et validation expérimentale



FIG. IV.2 : Modélisation de l'écoulement interne et externe d'une buse à turbulence [15]

# Chapitre V

# Application du modèle à l'écoulement interne et externe d'une buse agricole

#### V.1 Description générale de la buse

Nous avons choisi de travailler avec une **buse à turbulence** avec un angle 80° disponible dans le commerce puisque ce type de matériel est très souvent utilisé en arboriculture et en viticulture, secteurs d'activité générant des pollutions de l'air importantes, et représentant un enjeu considérable en région Languedoc-Roussillon, lieu d'implantation de notre laboratoire de recherche. Nous avons été obligés de faire un choix dans le cadre de cette étude; cet injecteur est pris en exemple et ne constitue en aucun cas une limitation à notre travail, ce dernier se veut général de manière à pouvoir être transposé à tout type de buse.

Pour faciliter la compréhension ultérieure de ce rapport, la buse utilisée est schématisée sur la Figure V.1 qui suit et son principe de fonctionnement est brièvement rappelé :



FIG. V.1 : Buse à turbulence

Cette figure correspond à une coupe longitudinale de la buse. Les parties solides sont colorées en marron et celles fluides en bleu. Le liquide pénètre dans la buse au niveau d'orifices d'entrée puis descend progressivement jusqu'à atteindre la chambre de swirl par des canaux tangentiels. Une coupe transversale réalisée à ce niveau et donnée sur la figure V.2 permet de mieux visualiser ces organes :



FIG. V.2 : Coupe transversale au niveau de la chambre à turbulence

Le fluide est alors mis en rotation, puis accéléré dans un convergent. Il passe ensuite au travers d'un col suivi d'un divergent et enfin, sort par un orifice circulaire sous forme d'un cône liquide. L'analyse des jets fournis par ces buses indique la présence d'une couronne conique formée de gouttelettes relativement grosses et, au centre, des gouttes fines; un effet d'entraînement des petites gouttes par la masse d'air mise en mouvement par la couronne des grosses gouttes est, par ailleurs, observé. La nappe liquide ainsi obtenue se propage, ensuite, dans l'air avec lequel elle interagit au travers d'effets interfaciaux. De petites perturbations se développent alors à sa surface. Elle se met à osciller de plus en plus, et finit par se fragmenter pour donner des ligaments. A leur tour, ces fragments voient leur surface osciller et se fractionnent en petites gouttelettes.

### V.2 Discrétisation des équations et mise en œuvre numérique

Nous avons réalisé nos calculs avec le logiciel commercial **FLUENT** (version 6.2.16). Le choix de ce code informatique a été fait car la Direction Scientifique du CEMAGREF l'a décidé ; il se justifie par la disponibilité, la convivialité et l'usage très répandu de ce dernier en Mécanique des Fluides, notamment, dans les domaines universitaire et industriel. Le logiciel FLUENT intègre trois modules principaux :

- le pré-processeur mailleur, GAMBIT, qui permet de concevoir la géométrie ou de l'importer à partir d'un logiciel de C.A.O. et de générer le maillage (tétraédrique, hexaédrique, hybride, ...);
- le **solveur** lui-même, Fluent, qui résout les équations modélisant le problème physique sur le maillage;
- le post-processeur qui permet de visualiser et d'exploiter les différents résultats à l'écran.

Le point positif de ce code est sa capacité à supporter de forts rapports de masse volumique puisque dans notre étude, ce rapport est de l'ordre de 1000. Son gros désavantage réside dans le fait qu'il n'est pas possible d'entrer dans les lignes de programmation excepté à l'aide d'« User Defined Function »(UDF). Ces fonctions sont programmées en langage C puis implémentées dans le code. Elles rendent possibles l'adaptation, l'introduction d'équations supplémentaires ou de termes dans les équations de transport (termes source), la spécification de conditions initiales et aux limites, ainsi que la modification de paramètres de modèles spécifiques (comme la turbulence, les réactions, ...) ou des fluides mis en jeu (masse volumique, viscosité, conductivité, diffusivité, ...). Il est à noter, cependant, que leur mise en œuvre requiert la résolution d'un certain nombre de problèmes d'ordre numérique. Pour notre modélisation, une équation de transport supplémentaire, celle de la surface liquide moyenne par unité de volume,  $\overline{\Sigma}$ , a été ajoutée via ces sousprogrammes.

Dans le code, le système constitué par les équations de conservation et de transport énoncées aux chapitres précédents, à savoir les équations III.5, III.6, III.8, III.28 et IV.4 (avec les modélisations retenues pour leur fermeture) est résolu grâce à une **méthode aux volumes finis**. Pour sa discrétisation, l'utilisation d'un schéma numérique du premier ordre de type amont s'est imposée. Le choix d'un tel schéma s'explique par le fait que le second ordre conduisait à une divergence des calculs. En revanche, pour obtenir une bonne précision de résultats, il est indispensable d'établir un maillage plus raffiné.

Le système matriciel ainsi obtenu est ensuite résolu à l'aide d'un algorithme dit de Gauss-Seidel, c'est-à-dire de manière séquentielle. A chaque itération, les valeurs des variables des cellules sont prises égales à celles de l'itération précédente, auxquelles on ajoute un terme correctif. Ce dernier est obtenu grâce au **couplage pression-vitesse** qui est réalisé a l'aide de l'algorithme SIMPLE (« Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations »). La convergence du système est finalement déterminée à partir des résidus des équations de conservation. Dans le cadre de nos calculs, les critères de convergence pour les variables sont fixés à  $10^{-3}$ . Par ailleurs, il a fallu réaliser un travail considérable pour déterminer les facteurs de sous-relaxation qui permettent d'obtenir des résultats réalistes.

### V.3 Géométrie du domaine de calcul et conditions aux limites

La modélisation de l'écoulement doit être **tridimensionnelle**. Les canaux tangentiels générent, en effet, une composante de vitesse tangentielle qui rend impossible toute modélisation bidimensionnelle axisymétrique.

Afin de rendre la buse **symétrique**, la forme des orifices d'entrée a été modifiée mais en conservant la même surface. Grâce à cette opération, il a été possible d'appliquer une **condition de périodicité** et l'étude de l'écoulement au sein de la buse s'est réduite à celle d'une **demi-géométrie** seulement. Cette dernière a été mise en place grâce au logiciel de C.A.O. CATIA.

Nous avons ensuite procédé à l'extension du domaine de calcul en rajoutant à la sortie de la demi-buse un demi-cylindre de diamètre 14, 4 mm et de hauteur 5, 5 mm de manière à pouvoir étudier la formation de la nappe liquide.

Une fois la géométrie du problème définie, il a fallu préciser les conditions aux limites. Dans ce souci, nous avons essayé de choisir des dimensions sufisamment importantes pour le domaine de manière à s'affranchir de l'influence des frontières de la zone d'étude sur l'écoulement. Nous verrons au chapitre suivant que, malgré tout, des effets de bords sont toujours observés.



La géométrie et les conditions aux limites spécifiées sont rappelées sur la Figure suivante :

FIG. V.3 : Géométrie et conditions aux limites

En entrée, la pression est fixée à 5 bars et correspond à celle habituellement utilisée pour des applications arboricoles. En aval, sur les côtés du domaine de sortie une condition de pression de sortie (p = 0) est définie, autorisant un écoulement du fluide vers l'extérieur. Il s'agit de pressions relatives.

De plus, une condition aux limites pour la fraction massique liquide moyenne  $\tilde{Y}$  et pour la nouvelle variable introduite, à savoir la surface liquide moyenne par unité de volume  $\overline{\Sigma}$  est imposée en entrée; on impose  $\tilde{Y}_{entree} = 1$  c'est à dire que l'on suppose qu'en entrée de buse, il y a présence exclusivement de liquide et l'on prend une petite valeur pour  $\overline{\Sigma}$ , en l'occurence  $\overline{\Sigma}_{entree} = 0, 1$  de manière à ce que cette dernière n'ait pas d'influence sur les résultats. En toute rigueur, on devrait prendre  $\overline{\Sigma}_{entree} = 0$  puisque en entrée, le liquide se présente sous la forme d'un jet continu. Cependant, afin de permettre l'initialisation du calcul, il est nécessaire de donner à cette variable une valeur non nulle. Nous avons vérifié l'indépendance des résultats par rapport à cette condition initiale.

Des conditions pour la fraction massique liquide et pour la surface liquide moyenne sont également imposées sur les **bords du domaine de sortie**.

La condition aux limites associée à Y correspond à celle imposée par défaut dans Fluent :

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial n} = 0 & \text{où } \vec{n} \text{ est la normale à la face, si le fluide sort } (i.e. \ \vec{u} \cdot \vec{n} > 0) \\ \widetilde{Y} = 0 & \text{si le fluide (air) rentre dans le domaine } (i.e. \ \vec{u} \cdot \vec{n} < 0) \end{cases}$$
(V.1)

c'est à dire dans le cas où le fluide sort du domaine, on impose un flux nul, en revanche, si du fluide rentre, on donne à  $\tilde{Y}$  une valeur nulle.

Notre contribution a consisté à appliquer le même type de condition à la variable  $\overline{\Sigma}$ , *i.e.* :

$$\begin{cases} \frac{\partial \overline{\Sigma}}{\partial n} = 0 & \text{si le fluide sort} \\ \overline{\Sigma} = 0 & \text{si le fluide (air) rentre dans le domaine} \end{cases}$$
(V.2)

En effet, par défaut, dans Fluent,  $\overline{\Sigma}$  présentait une valeur nulle sur toute la face de sortie du domaine, ce qui était incorrect.

Pour s'assurer que la nouvelle fonction introduite permette de disposer des conditions aux limites voulues pour la variable  $\overline{\Sigma}$ , un calcul « test » a été réalisé dans lequel on a introduit un scalaire et une UDF qui permet de résoudre une équation supplémentaire équivalente à celle de la fraction massique liquide (c'est-à-dire une équation sans terme source et avec un coefficient de diffusion égal à  $\frac{\mu_t}{Sc_t}$ ). A l'issue de ce calcul, les résultats relatifs à la fraction massique liquide moyenne  $\widetilde{Y}$  et à ce scalaire étaient strictement identiques, ce qui confirme bien que la fonction utilisée pour imposer les conditions aux limites pour la variable  $\overline{\Sigma}$  fonctionne correctement. De plus, les différences observées entre les champs de grandeurs avec ou sans la mise en place de cette condition soulignent l'influence de cette dernière sur les résultats.

L'écoulement étant turbulent, il a fallu également spécifier des conditions aux limites pour les **quantités turbulentes**.

En entrée, l'intensité turbulente définie comme le rapport  $\frac{u'}{\overline{u}}$  est fixée à 10% et l'échelle de longueur turbulente correspond au diamètre de la plus grande entrée, et sur les faces du domaine de sortie, l'intensité est prise aussi égale à 10%, par contre, l'échelle correspond au diamètre de la section située après le premier divergent dans la buse. La connaissance de ces deux données permet le calcul de l'énergie cinétique turbulente et de son taux de dissipation.

Enfin, une condition périodique s'applique aux faces colorées en bleu sur la Figure V.3.

On rappelle aussi que la solution phytosanitaire pulvérisée est assimilée à un **liquide homogène** avec des caractéristiques propres (viscosité, ...). Dans un premier temps, le liquide mis en jeu sera de l'**eau**; ce n'est que par la suite que l'on considèrera des surfactants en modifiant la valeur de la tension superficielle  $\sigma$ . La configuration traitée sera celle d'un jet d'eau dans un milieu gazeux, l'air, au **repos**. Il sera bien évidemment possible dans le futur de considérer **un flux d'air** d'ailleurs souvent présent dans les techniques de pulvérisation agricole. On note, d'autre part, que conformément au modèle, ces deux fluides possèdent respectivement des masses volumiques constantes :  $\rho_l = 998, 2 kg \cdot m^{-3}$ et  $\rho_q = 1,225 kg \cdot m^{-3}$ .

De plus, nous avons considéré une approche **stationnaire** et l'influence de la gravité est négligée dans cette étude.

#### V.4 Maillage de la géométrie

La géométrie définie précédemment a ensuite été importée sous GAMBIT afin de générer le **maillage**.

Le maillage choisi est non structuré; il comporte environ 430 000 cellules de forme

tétraédrique car ce type de maille est particulièrement adapté aux géométries complexes comme la nôtre. Il est relativement grossier dans les zones situées en amont des canaux d'admission de la chambre de swirl étant donné leur faible influence sur l'écoulement, les tailles de mailles y sont de 0, 24 mm et 0, 12 mm. En revanche, il est raffiné vers la sortie de la buse, surtout au niveau du convergent et du divergent ainsi que du col qui les relie (voir Figure V.4).



FIG. V.4 : Raffinement du maillage au niveau du col

Dans cette région, les mailles mesurent 0,05 mm. Cette taille de mailles a été choisie dans le but de bien « capter » les phénomènes qui peuvent intervenir dans cette zone. La section la plus étroite (col) comporte 20 cellules.

Plus en aval, sur les faces du domaine de sortie, les mailles sont plus larges (0, 15 mm) afin de ne pas trop alourdir le temps de calcul.

Des tests ont montré qu'un raffinement plus poussé du maillage ne changeait pas significativement les résultats.

#### V.5 Calcul parallèle et temps de calcul

Au début de la thèse, nous avons réalisé les calculs en utilisant le « cluster » (ou grappe de PC) mis au point par le Cemagref et situé sur le site de Clermont-Ferrand. Nous avons pu apprécier les avantages d'un tel système : non seulement, il permet de répartir les calculs sur plusieurs processeurs mais aussi d'en lancer plusieurs à la fois. Ce qui permet d'aboutir à un allégement considérable des temps de calcul. Dans ce contexte, nous avons développé en collaboration avec l'équipe Fluent une procédure permettant de réaliser sur le cluster des calculs contenant des UDFS, ce qui n'était pas le cas jusqu'ici.

Malheureusement, par la suite, nous avons dû abandonner cette option. Un travail important a été fait et a permis, en effet, de mettre en lumière les défaillances du calcul parallèle. Des tests ont montré, en effet, que lorsque les calculs sont effectués par l'intermédiaire de la ferme de calcul, des différences de résultats avec le calcul en local sont observées même pour des cas basiques. Nous avons notamment considéré un calcul bidimensionnel faisant intervenir une géométrie proche de la nôtre (sortie du col de la buse) et le même type de conditions aux limites. Dans ce dernier cas, des différences notables de l'ordre de 3  $m \cdot s^{-1}$  pour la vitesse et de 700 Pa pour la pression sont également observées pour le calcul parallèle suivant qu'il soit mené avec un ou deux processeurs. On peut,

à ce propos, noter que des écarts non négligeables pour les résidus apparaissent dès les premières itérations.

Des tests comparatifs avec des calculs réalisés en double précision ont été également effectués. Nous avons pu constater que dans ce cas d'une part, aucune amélioration n'est observée en ce qui concerne les différences entre calcul local et parallèle, et d'autre part les résultats locaux obtenus avec des degrés différents de précision sont quasiment équivalents. Il semble donc au vu de ces constations qu'il soit inutile de travailler en double précision.

Les principaux résultats obtenus sont récapitulés sur les Figures V.5 et V.6 présentées sur les deux pages suivantes.

Dans notre étude où la géométrie et le maillage mis en jeu sont particulièrement complexes et où une équation supplémentaire est introduite, ce problème est encore accentué.

Ces résultats indiquent donc que le calcul parallèle n'est pas fiable et mettent en évidence les limites du code de calcul parallélisé. Toutefois, il se peut que, dans notre cas, le problème provienne du fait que les calculs sont supposés converger pour des résidus inférieurs à  $10^{-3}$ ; peut-être une meilleure convergence atténuerait ces difficultés numériques.

Par conséquent, pour remédier à ces dysfonctionnements et garantir la fiabilité des données numériques, il a été nécessaire de travailler localement, ce qui génère des temps de calculs considérables et ralentit notablement la progression de ces travaux de thèse. A titre d'information, le temps moyen pour un calcul local est d'environ **12 heures** sur un Pentium 4 équipé d'un processeur de 3, 2 GHz.

Dans ce chapitre, nous avons appliqué le modèle Eulérien présenté dans les deux chapitres précédents au cas d'une pulvérisation agricole. Le maillage décrit et les conditions aux limites spécifiées seront validés à l'aide du code Fluent pour un jet d'eau dans de l'air et un jet composé de surfactants au chapitre VI. Les résultats ainsi obtenus seront exposés et discutés.















(b) calcul parallèle avec 1 processeur



(c) calcul parallèle avec 2 processeurs

 ${\bf FIG.}\ {\bf V.6}$  : Champ de vitesse suivant x

# Chapitre VI Résultats et discussion

L'objectif de ce chapitre est de présenter les résultats relatifs à **l'atomisation d'un jet liquide issu d'une buse à turbulence et injecté dans un milieu gazeux, l'air, au repos**. On s'intéressera au comportement du modèle avec les variations de constantes et de pression. Etant donné le peu de données expérimentales disponibles, nous avons essayé, au travers d'une campagne d'investigation de la zone dense du spray réalisée en 2007 (à l'Institut National Polytechnique de Grenoble), d'établir une comparaison préliminaire en vue de permettre le calage des différentes constantes de modélisation.

#### VI.1 Introduction

Au travers des paragraphes suivants, deux types de résultats seront exposés :

- les champs de certaines variables affichés dans le plan correspondant aux faces périodiques du domaine de calcul.
- les profils transversaux de certaines variables en quatre sections du jet :  $Z/D_{col} = 1$ ,  $Z/D_{col} = 2$ ,  $Z/D_{col} = 5$  et  $Z/D_{col} = 6$  en fonction de la distance radiale à l'axe du jet, y (cf. Figure VI.1).

Afin de faciliter la compréhension de la suite de ce rapport, nous rappelons ici sur la Figure VI.1 les principales cotes qui sont associées au domaine de calcul ainsi que les sections pour lesquelles seront donnés les profils :



L'origine du système de coordonnées se situe au milieu de la sortie du premier divergent de la buse. Dans le domaine situé en aval de la buse,  $y \in [-7, 2; 7, 2] mm$  et  $Z/D_{col} \in [0; 7]$ , soit  $Z \in [0; 6, 5] mm$ , x = 0.

### VI.2 Résultats concernant la dispersion du liquide

### VI.2.1 Champs et profils des fractions liquides moyennes $\widetilde{Y}$ et $\overline{\tau}$

Les champs des fractions massique  $\widetilde{Y}$  et volumique  $\overline{\tau}$  liquides moyennes sont représentés sur les Figures VI.2 et VI.3 suivantes :



**FIG.** VI.2 : Champ de la fraction massique liquide moyenne  $\widetilde{Y}$ 



FIG. VI.3 : Champ de la fraction volumique moyenne  $\overline{\tau}$ 

Ces champs sont très différents l'un de l'autre. Cette observation est confirmée lorsque l'on considère les représentations des profils transversaux de ces deux variables pour différentes sections du jet données sur les Figures VI.4 et VI.5.



FIG. VI.4 : Profils transversaux de la fraction massique liquide moyenne



FIG. VI.5 : Profils transversaux de la fraction volumique liquide moyenne

Comme en témoignent ces profils, le jet produit est **creux** : les fractions moyennes  $\tilde{Y}$  et  $\bar{\tau}$  possèdent une valeur minimum au niveau de l'axe du spray (*i.e.* y = 0) et sur ses bords. Ceci est cohérent avec les résultats expérimentaux disponibles dans la littérature [10].

Lorsqu'on s'éloigne du nez de la buse, selon y, la **dispersion du liquide** dans la **direction radiale** est très clairement visible. Le jet issu de la buse s'élargit progressivement vers l'aval de l'écoulement : en  $Z = 5 D_{col}$ , le diamètre du jet a plus que doublé par rapport au cas où  $Z = 1 D_{col}$  passant de 4, 2 mm à 11, 7 mm si l'on suppose que l'on se trouve sur les bords du jet pour les valeurs de la fraction massique liquide  $\tilde{Y}$  supérieures ou égales à 95%.

A mesure que le jet s'élargit et que l'air pénètre dans la phase liquide, les fractions massique et volumique au centre du jet décroissent. Cependant, des différences notables sont observées entre  $\tilde{Y}$  et  $\bar{\tau}$  sur les bords aussi. Elles s'expliquent par le fait que le liquide est beaucoup moins important en termes de volume qu'il ne l'est en termes de masse compte tenu de l'existence d'un fort rapport de masses volumiques entre les deux phases  $(\frac{\rho_l}{\rho_g} = 815).$ 

A titre d'exemple, en  $Z = 2 D_{col}$  et pour y = 4,5 mm, la masse liquide représente environ 99% de la masse totale alors que le volume occupé par le liquide ne correspond plus qu'à 7%. La Figure VI.6 représente  $\overline{\tau}$  en fonction de  $\widetilde{Y}$  tel que  $\overline{\tau} = \frac{\overline{\rho} \widetilde{Y}}{\rho_l}$  où  $\overline{\rho}$  est donné par  $\overline{\rho} = \frac{\rho_g}{1-\widetilde{Y}(1-\rho_g/\rho_l)}$ . La forte décroissance observée sur cette figure pour la courbe de la fraction volumique souligne bien cette réalité.



**FIG.** VI.6 : Fraction volumique  $\overline{\tau}$  en fonction de la fraction massique Y

#### VI.2.2 Champs et profils de la pression et de la vitesse

La représentation du champ de pression (voir Figure VI.7) dans l'écoulement montre un bon respect des conditions imposées en entrée : on retrouve bien une pression de 5 *bars* en entrée du domaine. Plus en aval, dans la chambre de swirl, les pressions sont réparties radialement : les hautes pressions se situent près des parois alors que les basses pressions se concentrent au centre tendant ainsi à créer une aspiration vers le fond de la chambre. La formation d'un cœur de pression relative négative est donc observée et a pour effet de ralentir l'écoulement axial au centre. Sur les bords du domaine, on a bien une pression relative nulle comme cela a été spécifié au travers des conditions aux limites. Une zone de dépression au niveau du domaine de sortie est également visible. Toutefois, on peut
noter que pour quelques cellules, la pression relative observée est inférieure à 0 bars, ce qui n'est bien entendu pas réaliste.



FIG. VI.7 : Champ de la pression moyenne

L'analyse des résultats (Figures VI.8(a), VI.8(b) et VI.8(c)) relatifs aux différentes composantes de vitesse conduit aux remarques suivantes. D'une part, la vitesse est essentiellement radiale à la sortie de la buse et tangentielle dans la chambre de turbulence. D'autre part, la composante axiale de la vitesse possède une valeur très faible dans la partie supérieure de la buse, elle présente en revanche un maximum de  $21 \ m \cdot s^{-1}$  au niveau du col. Elle prend des valeurs négatives principalement sur l'axe central de la géométrie.



(a) composante radiale de la vitesse





(c) composante axiale de la vitesse

FIG. VI.8 : Champs de vitesse

La représentation des vecteurs vitesse sur la Figure VI.9 confirme cet aspect : elle montre clairement que du fluide « remonte » vers l'entrée de la buse et met en évidence avec l'appui de la Figure VI.5 la présence d'une large zone de recirculation d'air à l'intérieur de la nappe liquide conique creuse [25].



FIG. VI.9 : Vecteurs vitesse dans la chambre de swirl et près du nez de la buse

Si on s'intéresse plus particulièrement aux profils transversaux (Figure VI.10) de cette composante axiale au col c'est à dire pour des sections voisines de  $Z/D_{col} = -1$ , on s'aperçoit que les profils de vitesse changent : à l'entrée du col, ils sont convexes sur l'axe z puis deviennent progressivement concaves. Cette propriété est essentielle, le principe de la buse à turbulence étant de produire en sortie un profil de vitesse en forme de nappe, où le fluide sort essentiellement par la périphérie.



FIG. VI.10 : Changement de profils de la composante axiale de la vitesse au niveau du col

De même, les profils transversaux pour les composantes de vitesse donnés sur la Figure VI.11 soulignent l'existence de vitesses axiales négatives importantes de l'ordre de  $27m \cdot s^{-1}$  au centre du jet. On constate que ce pic de vitesse négative correspond à des régions où la fraction massique  $\tilde{Y}$  est faible. Le profil de la composante axiale de la vitesse en  $Z = 2D_{col}$  montre la présence d'une couronne de fluide externe dont le maximum atteint  $12 m \cdot s^{-1}$  pour y = 4,9 mm.



FIG. VI.11 : Profils transversaux des composantes de la vitesse en  $Z/D_{col} = 2$ 

Il est intéressant de considérer les profils transversaux (Figure VI.12) de  $\overline{\rho} \widetilde{u}_{axiale} \widetilde{Y}$  qui correspond au produit de la masse volumique par la composante axiale de la vitesse et la fraction massique liquide afin de se renseigner sur l'évolution du débit.



**FIG. VI.12** : Profils transversaux de  $\overline{\rho} \, \widetilde{u}_{axiale} \, \widetilde{Y}$ 

En  $Z = 2 D_{col}$ , on remarque que même si la composante axiale de la vitesse est faible sur les bords de la nappe (y < -5 mm et y > 5 mm), le flux sortant correspondant est important.

#### VI.2.3 Profils des quantités turbulentes

Sur la Figure VI.13 sont représentés les profils transversaux de l'énergie cinétique turbulente.



FIG. VI.13 : Profils transversaux de l'énergie cinétique turbulente  $\tilde{k}$ 

L'énergie cinétique turbulente moyenne  $\tilde{k}$  est maximale sur les bords de la nappe liquide; elle possède alors une valeur d'environ  $12 m^2 \cdot s^{-2}$  en  $Z = 1 D_{col}$ , ce qui se traduit par une fluctuation de vitesse de l'ordre de  $2, 8 m \cdot s^{-1}$  en supposant l'isotropie des fluctuations de vitesse. Les ordres de grandeur mis en jeu semblent donc réalistes. De plus, la comparaison des profils de vitesse et des profils de  $\tilde{k}$  souligne que l'énergie cinétique turbulente est importante dans les régions où existent de forts gradients de vitesse moyenne. On note que le maximum de  $\tilde{k}$  se déplace vers l'extérieur du jet à mesure que l'on s'éloigne du nez de la buse. En revanche, le second pic observé pour la section  $Z = 2 D_{col}$  n'est pas physique. Il s'explique sans doute par les problèmes numériques générés à cause du brusque changement de conditions aux limites à la sortie de la buse entre la paroi du divergent et le domaine extérieur.

Il est également intéressant d'examiner les profils transversaux du temps caractéristique de la turbulence  $\tau_t = \frac{\widetilde{k}}{\widetilde{\epsilon}}$  (voir Figure VI.14).



FIG. VI.14 : Profils transversaux de  $\tau_t$ 

Le modèle au tenseur de Reynolds permet aussi le calcul des différentes composantes des tensions de Reynolds. A titre d'information, sont donnés sur les Figures VI.15, VI.16, VI.17, VI.18, VI.19 et VI.20 les profils transversaux des six composantes  $\overline{u''^2}$ ,  $\overline{v''^2}$ ,  $\overline{w''^2}$ ,  $\overline{u'' v''}$ ,  $\overline{u'' v''}$  et  $\overline{v'' w''}$ :



FIG. VI.15 : Profils transversaux de la composante  $\overline{u''^2}$ 



FIG. VI.16 : Profils transversaux de la composante  $\overline{v''^2}$ 



FIG. VI.17 : Profils transversaux de la composante  $\overline{w''^2}$ 



FIG. VI.18 : Profils transversaux de la composante  $\overline{u'' v''}$ 



FIG. VI.19 : Profils transversaux de la composante  $\overline{u'' w''}$ 



FIG. VI.20 : Profils transversaux de la composante  $\overline{v'' w''}$ 

#### VI.2.4 Influence de la modélisation du terme de diffusion sur les profils des fractions liquides

Comme nous l'avons déjà expliqué à la section III.5.1, Demoulin propose une nouvelle expression du flux liquide turbulent,  $\overline{\rho} u_i'' Y''$ , pour le cas d'un injecteur avec deux écoulements concourants, constitués d'un liquide lent au centre et d'un écoulement de gaz très rapide autour [27]. Nous avons testé cette nouvelle approche sur une configuration de buse. Les profils transversaux obtenus pour la fraction volumique liquide sont représentés et comparés à ceux fournis avec la fermeture classique de type « premier gradient » sur la Figure VI.21 :



FIG. VI.21 : Comparaison des profils transversaux de  $\overline{\tau}$  pour les deux approches en  $Z = 2 D_{col}$ 

L'application de la nouvelle modélisation au cas d'une buse swirlée donne un profil de la fraction volumique en  $Z = 2 D_{col}$  dont l'allure est assez similaire à celle obtenue avec une approche classique. Cependant, les maxima observés sont beaucoup plus faibles. Peut-être ces résultats se rapprochent-t-ils davantage de ceux obtenus dans le cas d'un jet liquide assisté par un écoulement d'air à grande vitesse.

Dans cette section est apparue l'importance d'utiliser une modélisation adéquate pour le terme de diffusion du flux liquide turbulent. La généralisation de l'approche suggérée par Demoulin ne semble pas immédiate. Plusieurs autres tests doivent être réalisés afin de valider ou éventuellement modifier l'expression correspondante de manière à obtenir une relation valable pour des configurations variées.

Par la suite, on a choisi de ne pas considérer cette nouvelle expression pour le flux liquide turbulent dans nos calculs mais l'approche de type gradient.

### VI.3 Résultats concernant la taille des fragments liquides

Sur la Figure VI.22, sont exposés les profils transversaux de la surface liquide moyenne par unité de volume,  $\overline{\Sigma}$ , pour l'expression initiale de A dans le modèle (expression IV.15).



FIG. VI.22 : Profils transversaux de la surface volumique  $\overline{\Sigma}$ 

On retrouve les valeurs minimales de la surface liquide moyenne  $\overline{\Sigma}$  là où la fraction volumique liquide  $\overline{\tau}$  est minimale aussi. Néanmoins, les maxima de  $\overline{\Sigma}$  ne sont pas localisés exactement sur les côtés du spray, là où pourtant en théorie la production d'interface devrait être maximale.

La résolution de l'équation de transport de la variable  $\overline{\Sigma}$  permet avec celle de la fraction massique liquide  $\widetilde{Y}$  de déterminer une taille caractéristique des gouttes produites (cf. équation IV.2) : r. On rappelle que le calcul de cette variable est réalisé au centre de toutes les cellules du domaine mais n'a de signification physique que dans les zones où le liquide représente la phase dispersée. En effet, dans les régions où il y a présence exclusivement de liquide, la surface liquide est alors nulle et par suite, le rayon r tend vers l'infini. On redonne ici l'expression de ce rayon moyen :

$$r = \frac{3\,\overline{\rho}\,Y}{\rho_l\,\overline{\Sigma}}$$

Ses profils transversaux obtenus avec l'expression initiale de A sont donnés sur la Figure VI.23 :



FIG. VI.23 : Profils transversaux du rayon moyen r des gouttes

Ces représentations indiquent que le jet produit est constitué d'une couronne conique de gouttes assez grosses, dont le rayon varie de 19 à 66 microns et en son centre de gouttelettes de rayon plus faible allant de 6 à 39 microns. Il semble qu'il y ait une « répartition en couche » des rayons en fonction de leur taille. Ces résultats sont là encore en accord avec les données expérimentales.

# VI.3.1 Comparaison des rayons moyen r et d'équilibre théorique $r_{eq}$ des gouttes

L'expression du rayon moyen r calculé avec le modèle a été rappelée au paragraphe précédent. Comme on l'a vu dans le chapitre IV, il est possible de considérer également

un rayon d'équilibre théorique dont on précise ici l'écriture :

$$r_{eq} = C \frac{\sigma^{3/5} C_{\mu}^{3/10} \left(\overline{\rho} \, \widetilde{Y}\right)^{2/15}}{\widetilde{\epsilon}^{2/5} \, \rho_l^{11/15}}$$

Les profils transversaux associés à chacun de ces rayons sont tracés pour la section  $Z = 2 D_{col}$  et donnés sur la Figure VI.24 :



**FIG. VI.24 :** Comparaison des profils transversaux des rayons moyen r et d'équilibre théorique  $r_{eq}$  des gouttes en  $Z = 2 D_{col}$ 

On constate qu'avec le rayon r calculé par le modèle, les gouttes produites au centre du jet sont plus petites. La cassure du jet semble donc dans ce cas plus importante. En revanche, on constate que vers l'extérieur du jet, des gouttes plus grosses existent. Ainsi, la modélisation utilisée semble intéressante.

#### VI.3.2 Influence relative des contributions a pour $A \neq 0$

Nous avons également examiné les valeurs des contributions  $a_{turb}$ ,  $a_{coll}$  et  $a_{turb} + a_{coll}$  (expressions IV.6, IV.12 et IV.13) pour un même calcul dans lequel  $A \neq 0$  et possède l'expression IV.24. Sur la Figure VI.25, les profils respectifs de ces différentes contributions sont présentés pour la section  $Z = 2 D_{col}$ :



FIG. VI.25 : Comparaison des profils des contributions a en  $Z = 2 D_{col}$ 

Pour interpréter cette courbe et aussi celles qui suivent, il faut garder en mémoire où est le liquide : seuls les endroits où se trouve une quantité notable de liquide sont intéressants, c'est à dire, en gros, pour y compris entre 0,004 m et 0,005 m. Ce qui se passe ailleurs n'aura pas vraiment d'effet sur le liquide, qui seul nous intéresse ... On pourrait d'ailleurs limiter le tracé des courbes à cette zone.

Sur cette représentation, on voit clairement que la contribution  $a_{coll}$  est ici plus importante que la contribution  $a_{turb}$  au niveau de cette zone particulière.

Si on se place dans une section plus en aval, comme  $Z = 5 D_{col}$  (voir Figure VI.26), la même tendance est observée.



FIG. VI.26 : Comparaison des profils des contributions a en  $Z = 5 D_{col}$ 

#### **VI.3.3** Influence relative des contributions a pour A = 0

Nous avons considéré différents calculs pour lesquels la contribution A est prise égale à 0.

Un premier calcul a consisté à faire intervenir seulement **la contribution**  $a_{turb}$ ,  $a_{coll}$ **étant prise égale à** 0. Dans ce cas, le rayon moyen r a pour profil transversal en  $Z = 2 D_{col}$ :



FIG. VI.27 : Profils transversaux du rayon moyen r des gouttes en  $Z = 2 D_{col}$  (calcul 1)

Le rayon obtenu est compris entre [0, 2; 1, 4] mm. On constate par ailleurs qu'il y a un coefficient 10 entre le rayon des plus petites gouttes et celui des plus grosses. La contribution  $a_{turb}$  semble « casser » les gouttes surtout au centre (où l'on observe un rayon d'environ 0, 2 mm).

Un second calcul est revenu à considérer uniquement la contribution  $a_{coll}$ ,  $a_{turb}$  étant nulle. Le profil du rayon moyen en  $Z = 2 D_{col}$  est alors le suivant :



**FIG.** VI.28 : Profils transversaux du rayon moyen r des gouttes en  $Z = 2 D_{col}$  (calcul 2)

Le rayon calculé appartient pour ce cas à l'intervalle [2, 9; 3, 6] cm. Autrement dit, ce rayon est de l'ordre du centimètre c'est à dire 10 fois plus grand par rapport au calcul 1. Cependant, on peut remarquer que ce dernier ne varie pour ainsi dire pas : entre les gouttes de plus grande taille et celles les plus petites, existe un coefficient 1. Les gouttes sur les bords du jet ont un rayon de 3 cm et au centre d'environ 2, 9 cm. La contribution  $a_{coll}$  joue partout pareil et peu.

Dans un troisième calcul, les contributions  $a_{turb}$  et  $a_{coll}$  ont été toutes deux considérées. Le rayon moyen possède dans ce dernier cas le profil suivant en  $Z = 2 D_{col}$ :



FIG. VI.29 : Profils transversaux du rayon moyen r des gouttes en  $Z = 2 D_{col}$  (calcul 3)

Le profil obtenu a la même allure que celui résultant du calcul 1 ( $a_{turb} \neq 0$  et  $a_{coll} = 0$ ). En revanche, le rayon est compris entre [0, 1; 0, 8] mm. Il semble donc que  $a_{coll}$  atténue les pics observés : lorsqu'on considère les deux contributions, la taille maximale correspond à 0,8 mm contre 1,4 mm quand seule  $a_{turb}$  est considérée. La contribution  $a_{coll}$  joue dans les branches de la nappe liquide.

Ainsi, la contribution  $a_{turb}$  pilote la cassure du jet puisqu'elle conduit à la plus forte diminution de rayon et la contribution  $a_{coll}$  joue quand même dans la nappe *i.e.* là où se trouve du liquide.

#### VI.3.4 Influence relative des contributions a et A

Sur la Figure VI.30, les profils respectifs de la contribution a (expression IV.13) et de la contribution A initialement considérée dans les calculs (expression IV.15) sont comparés pour la section  $Z = 2 D_{col}$ :



FIG. VI.30 : Comparaison des profils des contributions a et A en  $Z = 2 D_{col}$ 

Ces profils montrent que la contribution A est bien plus forte que a seulement aux endroits où il n'y a pas de liquide, donc cela ne doit pas jouer sur celle-ci.

#### VI.3.5 Influence de la nouvelle modélisation de la contribution A

Ensuite, nous nous sommes intéressés aux résultats obtenus en utilisant les nouvelles expressions développées pour la contribution A (expression IV.24, IV.25 et IV.26). Les résultats pour chacune de ces expressions sont regroupés sur la Figure VI.31 suivante :



**FIG.** VI.31 : Comparaison des contributions A en  $Z = 2 D_{col}$ 

Les différentes contributions semblent relativement similaires. Il n'y a donc rien d'étonnant à ce que les résultats concernant la surface liquide moyenne semblent équivalents quelle que soit l'expression considérée comme l'indique la Figure VI.32. La même tendance est observée pour les rayons moyens.



FIG. VI.32 : Comparaison des profils de la surface liquide moyenne obtenus avec et sans la nouvelle modélisation de A en  $Z = 2 D_{col}$ 

En revanche, on constate que, pour les nouvelles expressions de A, la surface liquide moyenne est plus importante par rapport au cas où l'on considérait l'ancienne expression de A.

Si l'on considère maintenant l'influence relative des différents termes présents dans ces nouvelles expressions, on s'aperçoit que la divergence de la vitesse dans le jet n'est pas nulle, comme c'est le cas pour un fluide incompressible. Sur les Figures VI.33 et VI.34 suivantes sont donnés certains des profils qui ont été tracés pour la section  $Z = 2 D_{col}$ :



FIG. VI.33 : Comparaison des profils des termes de la nouvelle modélisation de A en  $Z = 2 D_{col}$ 



FIG. VI.34 : Comparaison des profils des termes de la nouvelle modélisation de A en  $Z = 2 D_{col}$ 

#### VI.3.6 Influence de la pression d'injection

La buse étudiée est une buse à turbulence avec un angle de  $80^{\circ}$ . Pour ce matériel, la plage de pressions recommandées va de 3 à 20 bars. Nous avons testé l'influence de la pression. Pour réaliser ces calculs, nous avons considéré l'expression IV.15 par défaut de la contribution A. Les résultats concernant la surface liquide moyenne par unité de volume (Figure VI.35) soulignent une augmentation considérable de cette surface pour une pression de 15 bars.



**FIG.** VI.35 : Profils transversaux de la surface volumique  $\overline{\Sigma}$  pour 5 et 15 bars

Cela se traduit bien évidemment par une diminution du rayon moyen des gouttes dans le jet sauf au centre où se trouvent quelques gouttes plus grosses de rayon 32 microns comme le montre la Figure VI.36.



FIG. VI.36 : Profils transversaux du rayon moyen r des gouttes pour 5 et 15 bars

Ces résultats sont cohérents avec les expérimentations où l'on observe également la même tendance : une réduction du diamètre des gouttes lorsque la pression augmente. Ainsi, le modèle semble réagir correctement.

#### VI.3.7 Prise en compte des surfactants

Le rôle principal des surfactants est de favoriser l'étalement des gouttes sur la cible et d'éviter le rebond sur la végétation en diminuant la tension de surface. C'est pourquoi nous avons pris en compte la présence de ces produits dans la solution pulvérisée. Pour cela, nous avons joué sur la valeur de la tension de surface du liquide qui intervient dans le terme de destruction  $V_a \overline{\Sigma}^2$  (expression IV.23) de l'équation de l'aire interfaciale. Nous avons d'abord divisé par 10 puis par 3 la valeur initiale de  $72 m Nm^{-1}$  (eau), cette dernière valeur étant celle qui se rapproche le plus de la configuration réelle.

Les résultats relatifs à la taille des gouttes formées sont visualisés et comparés sur la Figure VI.37.



FIG. VI.37 : Profils transversaux du rayon moyen r avec ou sans surfactant

D'après les résultats du modèle, l'ajout de surfactants permet de produire plus d'interfaces mais a un effet indésirable puisque les gouttes formées sont plus petites sauf sur les bords du spray, et donc davantage sensibles à la dérive. Le modèle réagit comme on s'y attendait : diminuer la tension de surface qui apparaît dans le terme de destruction provoque bien évidemment une diminution de la destruction de la surface liquide moyenne et par suite, une augmentation de cette surface, ce qui aboutit par conséquent à une diminution du rayon moyen des gouttes.

Par la suite, il serait intéressant d'améliorer la prise en compte des surfactants en considérant la tension de surface dynamique variable au cours du temps de migration des molécules de tensio-actifs.

## VI.4 Comportement du modèle avec les modifications de constantes

Nous avons ensuite étudié l'effet des diverses constantes du modèle.

#### VI.4.1 Influence de la constante $\alpha_0$

La constante  $\alpha_0$  intervient dans l'expression du terme de production  $A \overline{\Sigma}$  (équation IV.15) de l'équation de l'aire interfaciale (équation IV.4). Initialement, dans le modèle, la valeur choisie pour cette constante était 1. La Figure VI.38 montre le profil du rayon moyen des gouttes en Z/Dcol = 2 pour 5 valeurs de cette constante : 1; 0, 1; 0, 01; 0, 001 et 0.



FIG. VI.38 : Influence de la constante  $\alpha_0$  sur le profil transversal du rayon moyen des gouttes r en  $Z = 2 D_{col}$ 

On constate comme il était attendu qu'une valeur plus faible de cette constante conduit à des gouttes plus grosses. L'effet de cette constante était prévisible : la diminution de  $\alpha_0$  entraîne une diminution de la production et donc de la surface liquide moyenne, ce qui se traduit par un rayon moyen de gouttes plus élevé. De plus, les courbes des profils transversaux du rayon moyen étant quasiment confondues pour  $\alpha_0 = 0, 01, \alpha_0 = 0, 001$  et  $\alpha_0 = 0$  (*i.e.* A = 0), il semble qu'il existe une valeur seuil de la constante  $\alpha_0$  à partir de laquelle on observe un effet notoire de cette constante sur les résultats.

Par ailleurs, on s'aperçoit au travers de ces résultats que dans le cas où  $A \neq 0$ , il n'existe pas de grosses gouttes comme lorsque A = 0, cela est sans doute dû au gradient de vitesse suivant y,  $\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y}$  qui intervient dans l'expression et qui est important comme le montre la Figure VI.39. Par ailleurs, on constate que le jet se casse davantage à la sortie de la buse (présence de petites gouttes) pour  $A \neq 0$ . Ceci est en accord avec ce qui était attendu car le fait de considérer une contribution A conduit à une production de surface plus importante et par suite à une augmentation de la surface liquide moyenne  $\overline{\Sigma}$ , ce qui se traduit par une diminution du rayon moyen.



**FIG.** VI.39 : Profils des contributions A, a et  $\frac{\partial \tilde{u}}{\partial u}$ 

#### VI.4.2 Influence de la constante $\alpha'_0$

Cette constante  $\alpha'_0$  apparaît dans la nouvelle modélisation de la contribution A, qui fait intervenir la norme du tenseur gradient de vitesse moyenne (expression IV.24). Le profil du rayon moyen des gouttes en Z/Dcol = 2 est visualisé sur la Figure VI.40 ci-dessous pour 5 valeurs de cette constante : 0,0001; 0,001; 0,01; 0,1 et 0.



FIG. VI.40 : Influence de la constante  $\alpha'_0$  sur le profil transversal du rayon moyen des gouttes r en Z = 2 Dcol

On remarque simplement que pour une valeur plus forte de la constante  $\alpha'_0$ , les tailles de gouttes calculées à la périphérie du jet sont plus faibles. Augmenter  $\alpha'_0$  revient, en effet, à faire croître la production et par conséquent, la surface liquide moyenne. Par suite, cela conduit à des rayons moyens de gouttes plus petits. Il semble là aussi qu'il existe une valeur minimale de  $\alpha'_0$  tel que l'influence de la constante devienne non négligeable. Il s'agit apparemment de la valeur 0,001.

#### VI.4.3 Influence de la constante C

La constante C est associée au terme de destruction de la surface  $V_a \overline{\Sigma}^2$  (expression IV.23). Jusqu'ici, on avait pris comme valeur de C: 1, 2. Le profil transversal du rayon moyen des gouttes en Z/Dcol = 2 est représenté sur la Figure VI.41 pour deux valeurs de C qui sont 1, 2 et 12 :



**FIG. VI.41 :** Influence de la constante C sur le profil transversal du rayon moyen des gouttes r en Z = 2 Dcol

Augmenter la constante C entraîne une augmentation de la destruction donc une diminution de la surface liquide moyenne  $\overline{\Sigma}$  et par suite, une augmentation du rayon moyen des gouttes : les gouttes sur les bords du jet sont plus grosses, leur rayon est d'environ 290 *microns* et non plus de 50 *microns*). Autrement dit plus la valeur de C est grande, plus la coalescence des gouttes est importante. Il semble, en outre, que le rayon des fragments liquides soit quasiment proportionnel à cette constante.

#### VI.4.4 Tracé des fonctions de répartition de rayon et de flux

Des représentations intéressantes qui permettent de mieux visualiser les tailles de gouttes et les flux mis en jeu dans l'écoulement correspondent au tracé des « fonctions de répartition » du Diamètre de Sauter Moyen (SMD) et du flux sur la face de sortie. Ces quantités sont données sur les Figures VI.42 et VI.43 :



FIG. VI.42 : Tracé de la fonction de répartition du rayon moyen r des gouttes produites



**FIG. VI.43 :** Tracé de la fonction de répartition du flux  $(\overline{\rho} \, \widetilde{u} \, \widetilde{Y} \, ds)$ 

On dispose de 8161 valeurs sur la face de sortie du domaine de calcul. La majorité des gouttes produites ont un diamètre compris entre 40 et 120 microns. On remarque aussi qu'il y a peu de grosses gouttes en nombre mais qu'elles correspondent par contre à 40% du flux, ce qui confirme ce que l'on avait constaté sur la Figure VI.12.

#### VI.5 Validation expérimentale

Une série d'expérimentations visant à caractériser la zone dense du jet a été réalisée au cours de l'année 2007 par la société « A2 Photonic Sensors » localisée à Grenoble. L'instrument utilisé est une sonde optique à fibre dédiée à l'étude des milieux diphasiques. L'élément sensible du capteur est une fibre optique amincie et usinée en pointe dont le maintien est assuré par un tube en Inox. Lorsque la sonde est introduite dans le milieu diphasique à caractériser, elle transperce les inclusions (bulles ou gouttes) en mouvement. A chaque passage d'une inclusion, le capteur détecte une variation d'intensité lumineuse causée par une réflexion en bout de fibre. Le signal optique ainsi obtenu, une fois conditionné, est interprété par le logiciel pour fournir **la concentration**, **la vitesse et la dimension des inclusions**. L'incertitude de mesure sur toutes les grandeurs est typiquement de 15% (plus faible sur la concentration) et la taille minimale de goutte détectable est de 15 microns environ.

Les mesures sont réalisées en plaçant le capteur dans la nappe de façon colinéaire par rapport au vecteur vitesse comme le montre la Figure VI.44.



FIG. VI.44 : Dispositif expérimental

La position relative des points de mesure entre eux est précise à  $\pm 10$  microns près. Par contre, leur position absolue sur l'axe y présente une incertitude estimée à  $\pm 400$ microns soit 0, 4 mm sur les profils en eau. Cette erreur vient de la difficulté à mesurer la position exacte de l'axe de symétrie du spray (*i.e.* y = 0). Pour déterminer sa localisation, la méthode consiste à placer la sonde parallèlement à l'axe (0z) et à la déplacer ensuite selon (0y) afin de couper les deux branches de la nappe liquide. Une estimation visuelle à l'oscilloscope permet alors d'estimer la position du centre de chacune d'elles et donc d'en déduire le diamètre du spray à une hauteur z donnée.

Sur la Figure VI.45 suivante, sont présentés d'une part les **profils transversaux numériques de la fraction volumique liquide** dans **tout le jet** pour différentes sections et d'autre part, les **profils expérimentaux** de cette variable dans **le milieu liquide uniquement** :



FIG. VI.45 : Comparaison des profils transversaux de la fraction volumique

Afin de faciliter la compréhension, par la suite, on désignera par « Num » les résultats numériques et par « Exp » les résultats expérimentaux délivrés.

Les représentations précédentes soulignent les faibles valeurs prises par la fraction volumique liquide (le maximun correspondant à environ 4 et 5%). L'allure des profils issus du calcul semble en accord avec l'expérience et les ordres de grandeurs mis en jeu dans les deux cas sont bons, ce qui est encourageant. On observe, cependant, un décalage radial du maximum des courbes pour la section Z/Dcol = 2,3 d'environ 2 mm et, pour les sections situées plus en aval, légèrement moindre. Autrement dit, le décalage observé n'est pas équivalent suivant la section considérée. Pour ce qui est de la section la plus éloignée du nez de la buse c'est à dire Z/Dcol = 6, 6 (courbe noire en pointillés), il est probable que le calcul soit « faussé » à cause de la proximité de la section de fin de calcul (effets de bords).

Le décalage ainsi observé peut s'expliquer en partie par les imprécisions liées à la position incertaine par rapport à l'axe du spray. Cependant, cela n'est pas suffisant pour justifier un tel décalage.

Le décalage du maximum des courbes est peut être dû aussi à une influence de la condition aux limites sur la buse autour du col (existence éventuelle d'une couche limite, ...) ou bien à une pression de départ pas tout à fait exacte, ou encore à un mauvais calcul, en l'occurence, trop faible, de la perte de pression dans l'injecteur. Notons ici à ce propos qu'expérimentalement pour des pressions de 5 et 7 bars c'est à dire une différence de 2 bars, un décalage radial de la nappe d'eau de seulement 0, 5 mm est observé [34].

Pour parvenir à un meilleur accord entre les résultats des expériences et du calcul, il semble donc nécessaire d'apporter des améliorations au modèle.

Par ailleurs, il est clair que quelle que soit la position axiale, la largeur de la nappe calculée avec le modèle est trop large, ce qui semble indiquer que le modèle conduit à une diffusion trop importante, autrement dit que le coefficient de diffusion du liquide est un peu fort. A titre d'exemple, si on considère la largeur du jet pour la section Z/Dcol = 2,3 (courbes vertes) lorsque la fraction volumique liquide moyenne  $\overline{\tau}$  vaut 0,5%, elle est approximativement de 1 mm pour l'expérience alors que le modèle donne 2,8 mm.

Le débit total de liquide mesuré est obtenu de la manière suivante :

$$Q = \sum 2 \pi r_i \alpha_i V_i dr$$

avec  $r_i$  le rayon qui correspond à la distance radiale (par rapport à l'axe du spray) à laquelle se trouve la tête de la sonde,  $\alpha_i$  le taux de présence liquide et  $V_i$  la vitesse au  $i^{ime}$  point de mesure. L'incertitude sur ce débit est de 25%. De plus, ce dernier est calculé par intégration d'un seul profil et en supposant que la nappe est homogène sur toute sa circonference, ce qui n'est pas démontré. Il est de 19,8 l/h, soit de 0,0055 kg/s. Si on compare cette valeur à celle du débit total calculé dans Fluent, à savoir 0,0053 kg/s, on s'aperçoit qu'elle est égale à 4% près, ce qui indique que le débit massique est bien conservé.

En ce qui concerne la vitesse, il ne faut pas oublier que le modèle permet de délivrer une vitesse moyenne pour le mélange alors que la vitesse mesurée expérimentalement correspond à celle du liquide. Cependant, aux endroits où il y a beaucoup de liquide, ces deux quantités peuvent être considérées comme très proches.



FIG. VI.46 : Comparaison des profils transversaux du module de vitesse

Cette figure montre à la fois les profils transversaux du module de vitesse issus du calcul dans tout le jet et les profils obtenus expérimentalement pour la zone liquide uniquement.

Le maximum observé pour le module de vitesse calculé est d'environ 26  $m \cdot s^{-1}$  au centre du jet pour la section Z/Dcol = 2,3 (courbes vertes), cela correspond aux fortes vitesses axiales négatives (grandes recirculations) présentes dans cette région : de l'air y remonte à très forte vitesse.

Pour les zones où peut être établie une comparaison, on constate que la vitesse calculée est comprise entre 3,4 et 17,5  $m \cdot s^{-1}$  alors qu'expérimentalement le module de vitesse possède des valeurs comprises entre 13,4 et 17,5 $m \cdot s^{-1}$ . Le modèle semble donc conduire à une sous-estimation des vitesses. Comme on l'a vu précédemment et lors de la comparaison des profils de la fraction volumique, le débit massique est conservé pour le calcul et l'expérience, et la nappe liquide obtenue numériquement est plus écartée et plus large. Par conséquent, il n'est pas surprenant que la vitesse soit dans ce dernier cas plus faible.

Pour les tailles, là encore, il faut se rappeler que le modèle permet de calculer un rayon moyen des gouttes dans tout le jet alors que l'expérience fournit une corde et ce uniquement dans le liquide. Les profils transversaux relatifs à ces deux grandeurs sont donnés sur la Figure VI.47.



FIG. VI.47 : Comparaison des profils transversaux du Diamètre Moyen de Sauter

Pour l'ensemble des courbes numériques et expérimentales, on voit que le calcul donne des diamètres compris approximativement entre 30 et 125 microns pour  $y \in$ [0,002;0,006] m, contrairement à l'expérience où les diamètres sont plus petits et varient entre 27 et 45 microns. On constate aussi que les résultats sont peu différents quelle que soit la position axiale considérée dans le calcul comme dans l'expérience. Peut-être pourrait-on penser qu'en changeant un peu une des constantes de modélisation, on pourrait se rapprocher de la taille de gouttes mesurée expérimentalement.

Par ailleurs, on peut noter d'une part que pour les 4 courbes numériques, au centre du jet, là où la distance radiale y est inférieure à 0,002m, les gouttes ont un diamètre compris entre 45 et 75 microns. D'autre part, pour les rayons forts c'est à dire pour y > 0.006 m, il semble que la tendance du modèle soit de produire des gouttes trop grosses. Ainsi, le terme de coalescence de gouttes paraît trop élevé lorsque l'on est en présence de peu de liquide. D'ailleurs, pour remédier à ce défaut du modèle, on peut essayer de multiplier le terme de destruction  $V_a \overline{\Sigma}^2$  de l'équation de la surface liquide moyenne par unité de volume (équation IV.4) par la fraction massique liquide moyenne,  $\tilde{Y}$ . Dans les régions où il y a très peu de liquide, c'est à dire pour lesquelles  $\tilde{Y}$  est proche de zéro, ce terme n'interviendra que faiblement, en revanche, dans les zones plus chargées en liquide, la destruction de surface liée à la coalescence des gouttes sera plus importante et par suite,

devrait affecter la taille des gouttes; la Figure VI.48 obtenue pour ce calcul montre que le diamètre des gouttes produites est légérement plus faible.



FIG. VI.48 : Profils transversaux du Diamètre Moyen de Sauter avec la nouvelle tentative de modélisation

Si on considère toutes les sections, il varie entre 35 et 62 microns au centre de la nappe pour y < 0,002 m au lieu de 45 et 75 microns comme précédemment. De même, pour ycompris entre 0,002 m et 0,006 m, ce diamètre vaut de 25 à 120 microns et non plus à 125 microns. Diminuer la destruction de surface conduit, en effet, à une augmentation de surface et par conséquent, à une réduction des tailles de gouttes produites.

Donc, pour la vitesse et le diamètre même si les résultats sont difficilement interprétables, ils sont qualitativement intéressants.

Pour conclure, on peut dire que l'approche mise en œuvre demande encore à être améliorée. Cependant, il est important de noter que c'est la première fois qu'on traite un cas aussi compliqué notamment en pulvérisation agricole. Les résultats sont malgré tout très encourageants mais bien évidemment perfectibles. Ce travail constitue une première étape et ouvre une nouvelle voie de recherche.

## Conclusion

Ce travail de thèse a été initié dans le but d'accroître l'efficacité des pulvérisations de pesticides et de réduire les émissions polluantes qui leur sont intrinsèques. Un moyen d'y parvenir est d'avoir une meilleure maîtrise des tailles et des distributions spatiales des gouttes produites par l'atomisation. L'étude de ce phénomène peut être abordée selon deux approches complémentaires : expérimentale ou numérique. Quelques études expérimentales existent mais elles concernent essentiellement les régions avales du spray, les mesures par laser étant difficilement réalisables dans la zone d'atomisation en raison de la forte densité liquide présente. L'approche adoptée ici est numérique. Au travers de l'étude bibliographique, nous avons rappelé les divers régimes de fractionnement des jets existants et les mécanismes qui en sont la cause. L'inventaire dressé des modèles d'atomisation a souligné un recours massif à un traitement Lagrangien des gouttes et a permis de mettre en évidence les limitations de ce type d'approche. Ces modèles s'accomodent d'une hypothèse d'injection sous forme de parcelles liquides et ne prennent donc pas en compte la dispersion initiale du liquide. Autrement dit, ils ne modélisent pas réellement la fragmentation primaire du jet.

Dans le cadre de ces travaux de recherche, nous avons choisi d'utiliser un modèle basé sur une formulation Eulérienne, inspiré de la modélisation des écoulements turbulents à masse volumique variable. La mise en œuvre de cette approche originale dans le code Fluent a demandé un travail considérable. Le modèle implémenté intègre les deux aspects de l'atomisation : la dispersion du liquide dans la phase gazeuse et le calcul d'une taille caractéristique pour les fragments liquides produits et cela en tout point de l'écoulement, au sein de la buse et à l'extérieur. La dispersion est obtenue via une équation de transport pour la fraction massique  $\tilde{Y}$  du type convection/diffusion sans terme source (utilisation d'une loi de type premier gradient pour le flux turbulent de la fraction massique). L'estimation de la taille des gouttes a quant à elle été réalisée en résolvant une équation de transport pour l'aire moyenne de l'interface liquide/gaz par unité de volume,  $\overline{\Sigma}$  dans laquelle les effets de capillarité, d'aérodynamique et de turbulence sont pris en compte via des termes de production et de destruction. Alors que la capillarité favorise la coalescence des gouttes et augmente leur taille, la turbulence et le cisaillement lié au gradient de vitesse moyenne tendent à les casser et par suite, à faire décroître leur taille.

Au cours de cette étude, nous avons examiné l'influence des expressions considérées pour les termes de l'équation de transport de l'aire interfaciale  $\overline{\Sigma}$ , de la pression d'injection et des constantes de modélisation. La confrontation avec les visualisations des jets s'est révélée positive. Il apparaît intéressant de considérer la contribution A dans les calculs pour rendre compte de l'étirement macroscopique de la surface liquide moyenne car ce terme semble jouer considérablement sur les résultats. Lorsque A est pris en compte, on constate que le jet se casse davantage à la sortie de la buse (présence de petites gouttes). La nouvelle modélisation du terme A au moyen d'expressions faisant intervenir la norme du tenseur gradient de vitesse moyenne aboutit, quant à elle, à une surface liquide moyenne plus importante et par conséquent à des tailles de gouttes plus faibles. L'examen des contributions a montre que la turbulence au travers de  $a_{turb}$  semble contrôler la cassure du jet puisqu'elle diminue le plus la taille des gouttes mais la collision avec  $a_{coll}$  joue là où il y a du liquide. D'autre part, le modèle se comporte comme on le pensait avec la pression d'injection : une hausse de pression conduit à un jet avec des vitesses plus fortes et des gouttes plus petites. Les surfactants peuvent effectivement être pris en compte dans le modèle au travers de la tension de surface, les gouttes produites sont alors plus petites et donc davantage susceptibles de contaminer l'environnement. Cependant, cette prise en compte pourra être améliorée par la suite en considérant une tension superficielle dynamique variable au cours du temps de migration des molécules de tensio-actifs. Le modèle semble bien réagir également aux modifications de constantes.

Nous avons pu valider les résultats obtenus concernant la dispersion du liquide grâce à une étude expérimentale réalisée dans la partie dense du spray avec une sonde optique. La comparaison des profils transversaux du taux volumique de liquide est satisfaisante. Concernant la taille caractéristique des fragments liquides produits par l'atomisation, les résultats obtenus sont qualitativement intéressants. La poursuite des expérimentations permettra un meilleur calibrage des constantes mises en jeu.

Le modèle semble donc fonctionner aussi bien pour des jets ronds que pour des nappes liquides. De plus, il donne des valeurs réalistes avec les mêmes constantes de modélisation que celles utilisées pour des cas très différents (automobile et aéronautique). Ainsi, les travaux effectués durant cette thèse tendent à valider le modèle. Ils constituent une première étape, certes novatrice et prometteuse, mais qui demande à être approfondie. Nous essayons d'ailleurs actuellement d'appliquer cette approche à une buse à fente, ce qui permettra de renforcer la légitimité du modèle.

La prochaine étape consistera à améliorer la prise en compte des produits réels intervenant dans les pulvérisations en jouant sur les propriétés physiques des fluides mis en jeu. Il sera intéressant de prendre un domaine de calcul plus large pour éliminer les effets de bord observés mais cela se fera au prix de temps de calculs plus lourds. Certains termes de l'équation de l'aire interfaciale pourront aussi être revus. Entre autres, il sera intéressant d'établir une nouvelle expression basée sur les collisions entre gouttes pour la contribution  $a_{coll}$  à partir de l'article publié par Saffman et Turner [83]. Par ailleurs, des corrections bas Reynolds pourront être envisagées pour adapter le modèle à des pulvérisateurs dépourvus de buses à pression d'injection (pulvérisateur pneumatique ou à buse centrifuge par exemple). Il sera également possible de considérer une équation de transport pour le flux de diffusion de  $\tilde{Y}$  dans laquelle interviendra le terme en  $\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}$ . Les termes  $-\overline{u_i^{''}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \overline{u_j^{''}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}$  pourront être pris en compte dans l'équation de transport du tenseur des contraintes de Reynolds. Ces termes qui n'existent qu'en écoulement à masse volumique variable (la moyenne de Reynolds de  $u_j^{''}$  est, en effet, non nulle dans ce cas) peuvent jouer un rôle très important dans notre écoulement.

A terme, le couplage du modèle d'atomisation avec un suivi Lagrangien est envisagé, il permettra de décrire entièrement le spray et par suite de mieux suivre le devenir des pesticides après leur application ; les gouttes, créées avec des tailles et des vitesses issues du modèle Eulerien, seront suivies jusqu'à la cible. Des modèles de fractionnement secondaire et de collision pourront être insérés ainsi que des modèles d'évaporation. « Comme dans la Vie, il est important de terminer sur une note humoristique et positive ! »





Ce poster a été réalisé dans le cadre des Journées du Département des Procédés Industriels et Agricoles de l'ADEME organisées les 13 et 14 Juin 2007.





Annexes
# Annexe A Utilisation du modèle $(k, \epsilon)$

L'exploration du code FLUENT nous a amenés à sélectionner le modèle de transport d'espèces pour décrire l'écoulement interne et externe de la buse, et à utiliser comme **modèle de turbulence**, le modèle aux tensions de Reynolds, qualifié aussi de « Reynolds Stress Model » ou plus simplement RSM.

L'ensemble des modèles de turbulence disponibles dans le code a, en effet, été testé, à commencer par le modèle  $(k, \epsilon)$  standard et ses multiples variantes  $((k, \epsilon)$  réalisable,  $(k, \epsilon)$  RNG, ...). Mais quelles que soient les options sélectionnées et les modifications apportées, le jet liquide obtenu en sortie de la buse était plutôt central et correspondait à un spray cylindrique et plein. Pour illustrer ces propos, le champ de masse volumique moyenne obtenu avec le modèle  $(k, \epsilon)$  standard est représenté sur la Figure A.1 :



FIG. A.1 : Champ de la masse volumique moyenne

Le maximum observé pour l'énergie cinétique turbulente est approximativement de  $600 m^2 \cdot s^{-2}$ , ce qui se traduit par une fluctuation de vitesse très importante :  $20 m \cdot s^{-1}$  si l'on suppose l'isotropie des fluctuations de vitesse.



**FIG. A.2** : Champ de l'énergie cinétique turbulente k

Les autres champs turbulents moyens calculés sont également surprenants et indiquent des valeurs très élevées.

Ces résultats sur l'allure du jet ne sont en aucun cas réalistes; ils sont en contradiction avec les visualisations de nappes liquides obtenues expérimentalement. Finalement, bien que nous ayons essayé de jouer sur le maillage et les ordres des schémas, nous avons été forcés d'admettre l'incapacité des différents modèles  $(k, \epsilon)$ , à décrire convenablement la turbulence dans notre écoulement. Même s'il est plus coûteux en temps de calculs (environ 12 heures), le modèle aux tensions de Reynolds est le seul capable de fournir des caractéristiques de turbulence correctes avec notre modélisation : la nappe liquide issue de la buse est bien conique et creuse, et les différentes quantités turbulentes (énergie cinétique, fluctuations, ...) possèdent des ordres de grandeurs raisonnables. Annexe B

### Acte du congrès EUROMECH 2007

### Contribution to the modelling of pesticide spraying in order to reduce pollutions

Magali De Luca<sup>1</sup>, Ariane Vallet<sup>1</sup>, Roland Borghi<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Cemagref, UMR ITAP, BP 5095, F-34196 Montpellier cedex 5, France magali.de-luca@cemagref.fr ariane.vallet@cemagref.fr

<sup>2</sup> EGIM-LMA, Technopôle de château Gombert, IMT, 13013 Marseille, France borghi@lma.cnrs-mrs.fr

France is the world's third biggest pesticide user. Significant share of these chemicals are used in agriculture, mainly in viticulture (20% of overall consumption) to protect crops from unwanted plants, animals, fungi or micro-organisms like bacteria and viruses. However, not all the applied product reaches the target area, some may be released into the environment, leading to the contamination of water, soils and air, and adversely affecting humans and living organisms [1]. Therefore, it is coming under increasing pressure to reduce pesticide use, prevent spray drift and minimise environmental pollution [2]. To reach theses objectives, the spraying process must be optimized. Up to now, many studies have been made to quantify pesticide losses due to spray drift and to identify their causes. They have confirmed that droplet size and velocity strongly influence spraving efficiency. Small droplets maximize spray coverage but are more likely to drift or to evaporate. Large droplets provide reduced coverage but are not subject to drift. During pesticide spreading, the stake is to succeed in producing droplets that give the coverage needed, while keeping drift to a minimum. Our research aims to model the atomization process so that droplet size, velocity distributions and liquid dispersion can be assessed in order to characterise the flow and to better understand how droplets are formed. To evaluate these parameters, an Eulerian model based on fuel injection characterization studies [3] is used. The key idea of this model is to regard the complex mix sprayed as a single fluid with the specific characteristic of having a variable density ranging from air to liquid value [4]. The originality of this approach resides in its ability to estimate liquid dispersion by using the atomization model and not to set it a priori as inlet conditions for transport models. This latter quantity is computed by using a turbulent diffusion-flux equation. The mean size of liquid fragments is calculated through the modelling of the mean surface area of the liquid-gas interface per unit of volume. The equation related to this variable is composed of various terms that take into account the physical phenomena responsible for interface stretching and collapse. Turbulence is modelled using a Reynolds Stress Model. These equations are implemented into the commercial CFD code, Fluent and are applied to an agricultural swirl nozzle. Numerical three-dimensional calculations of the flow inside the nozzle and in the dense spray region (considering steady liquid jet in a stagnant medium) are conducted up to 1cm of the exit. Results concerning the liquid dispersion are in good agreement with experimental shadowgraph images; they show the same morphological behaviour of the jet: we obtain a hollow conical liquid sheet and the presence of an ascending recirculation area that indicates the formation of an air core is underlined. The comparison of the model outputs with experimental data, concerning droplet size evolution in the flow field, is encouraging. It shows that spray break-up occurs very close to the nozzle exit. The main features of the phenomenon seem to be comprised by the model although they are imperfections. It is necessary to validate the model with appropriate experimental data for the dense part of the spray. Values of constants might be adjusted, and even, the details of the closure hypothesis might have to be changed according to ongoing experimental results. The model outputs could be later used by nozzle and pesticide manufacturers to test their prototype: the model allows them to know the droplet-size

spectrum and thus, to estimate environmental risk. Based on these promising results, the next step is to couple such a method to a Lagrangian transport model.



Figure 1 – Profils transversaux de la fraction volumique liquide moyenne et du diamètre moyen des gouttes en différentes sections du jet

#### References

[1] ASQAB (2005). Les pesticides dans l'air France-Comtois, Analyse en 2003 des pesticides présents dans l'air de plusieurs villes de Franche-Comté, Rapport d'étude.

[2] Aubertot, J.N. & Barbier, J.M. & Carpentier, A. & Gril, J.J. & Guichard, L. & Lucas, P. & Savary, S. & Savini, I. & Voltz, M. (éditeurs) (2005). Pesticides, agriculture et environnement. Réduire l'utilisation des pesticides et limiter leurs impacts environnementaux, Rapport d'expertise scientifique collective, INRA et Cemagref (France).

[3] Beau, P.-A. & Lebas, R. & Funk, M. & Demoulin, F.-x.. Multiphase flow approach and single phase flow approach in the context of Euler model for primary break up, actes du congrès llass, Nottingham, septembre 2004.

[4] Vallet, A. & Burluka, A. & Borghi, R. (2001). Development of an Eulerian model for the « atomization » of a liquid jet, Atomisation and spray, 11 (5), 521-544.

### Liste des tableaux

II.1	Récapitulatif sur les méthodes de résolution de l'interface dans un modèle de mélange	
	pour un écoulement diphasique	81
II.2	Comparatif des différentes méthodes de modélisation diphasique	84
II.3	Comparaison des méthodes à maillage fixe	85
III.1 III.2	Informations fournies suivant les différents niveaux de fermeture	98 104
IV.1	Constantes de modélisation	116

## Table des figures

I.1	Tonnage des substances actives vendues en France [7]	27
I.2	L'agriculture française en chiffres [1] et [3]	28
I.3	Consommation de pesticides pour les différentes cultures [7]	28
I.4	Tonnage des diverses classes de pestiticides [7]	30
I.5	Les différentes voies d'exposition [6]	31
I.6	Voies et mécanismes de dispersion dans l'environnement [84]	33
I.7	Transfert des pesticides dans l'environnement [6]	34
I.8	Dérive lors des pulvérisations	35
I.9	Risque de dérive en fonction de la dimension des gouttelettes [7]	36
I.10	Couverture de la cible	37
I.11	Les formes de jet des buses classiques [17]	38
I.12	Schéma de la buse à injection d'air [17]	40
I.13	Figure récapitulative des buses à dérive limitée [17]	40
I.14	Pulvérisation aérienne	42
I.15	Les principaux types de pulvérisateurs [17]	42
I.16	Différents pulvérisateurs	43
II.1	Breakup primaire et secondaire (d'après Hermann [37])	48
II.2	Fractionnement d'un jet à faible vitesse d'injection [91]	48
II.3	Longueur de pénétration et angle d'un spray conique creux [91]	49
II.4	Courbe de stabilité [74]	51
II.5	Régime de Rayleigh (C à D) [30] $\ldots$	52
II.6	Régime de « First wind-induced breakup » (E à F) [30]	52
II.7	Régime de « Second wind-induced breakup » (F à H ou F à G) [30]	52
II.8	Régime d'atomisation (au-delà de H ou G) [30]	52
II.9	Régime de fractionnement en fonction de $We_q$ [30]	53
II.10	Limites qualitatives des régimes de fractionnement [74]	54
II.11	Les différents régimes d'écoulement pour un jet creux [19]	55
II.12	Régime d'atomisation en sac [73]	57
II.13	Régime d'atomisation par arrachement [73]	58
II.14	Oscillation d'une goutte autour de sa position d'équilibre [69]	59
II.15	Représentation schématique des ondes se formant à la surface du jet, donnant naissance	
	à des gouttes [75]	61
II.16	Désintégration continue de la goutte mère pendant le temps de rupture avec le modèle	
	Wave [75]	62
II.17	Géométrie d'un groupe de gouttes de diamètre $d$ et d'espacement $x$ [36]	66
II.18	Valeurs des constantes du modèle Wave-FIPA en fonction de l'espacement relatif des	
	gouttes [36]	66

II.19	Concept du modèle de compétition KH-D.D.B. [71]	. 67
II.20	Philosophie et hypothèses sous-jacentes au modèle C.E.B. [68]	. 70
II.21	Maillage mobile élaboré pour étudier la déformation d'une bulle [50]	. 74
II.22	Méthode de suivi de front [11]	. 75
II.23	Représentation de la notion de maillage interfacial [99]	. 76
II.24	Représentation de l'interface avec une fonction indicatrice de phase	. 77
II.25	Exemple de reconstruction d'interface [11]	. 78
II.26	Représentation de l'interface avec la fonction Level Set	. 79
II.27	Jet d'eau formé à partir d'une bulle d'air de diamètre 1 cm (Sussman et Smereka, 199	7) 80
II.28	Modélisation des écoulements diphasiques	. 86
IV 1	Principe de collision	113
IV 2	Modélisation de l'écoulement interne et externe d'une buse à turbulence	. 110
1 , .2		. 119
	ι - Ι	
V.1	Buse à turbulence	. 121
V.2	Coupe transversale au niveau de la chambre à turbulence	. 122
V.3	Géométrie et conditions aux limites	. 124
V.4	Raffinement du maillage au niveau du col	. 126
V.5	Courbes de convergence des résidus	. 128
V.6	Champ de vitesse suivant x	. 129
VI.1	Coupe longitudinale du domaine d'étude	. 132
VI.2	Champ de la fraction massique liquide moyenne $\widetilde{Y}$	. 133
VI.3	Champ de la fraction volumique moyenne $\overline{\tau}$	. 133
VI.4	Profils transversaux de la fraction massique liquide moyenne	. 134
VI.5	Profils transversaux de la fraction volumique liquide moyenne	. 134
VI.6	Fraction volumique $\overline{\tau}$ en fonction de la fraction massique $\widetilde{Y}$	. 135
VI.7	Champ de la pression moyenne	. 136
VI.8	Champs de vitesse	. 136
VI.9	Vecteurs vitesse dans la chambre de swirl et près du nez de la buse $\ldots \ldots \ldots$	. 137
VI.10	Changement de profils de la composante axiale de la vites se au niveau du col $\ \ . \ .$	. 137
VI.11	Profils transversaux des composantes de la vites se en $Z/D_{col}=2$	. 138
VI.12	Profils transversaux de $\overline{\rho}  \widetilde{u}_{axiale}  \widetilde{Y}  \ldots  \ldots  \ldots  \ldots  \ldots  \ldots  \ldots  \ldots  \ldots  $	. 138
VI.13	Profils transversaux de l'énergie cinétique turbulente $\tilde{k}$	. 139
VI.14	Profils transversaux de $\tau_t$	. 140
VI.15	Profils transversaux de la composante $\overline{u''^2}$	. 140
VI.16	Profils transversaux de la composante $\overline{v''^2}$	. 141
VI.17	Profils transversaux de la composante $\overline{w''^2}$	. 141
VI.18	Profils transversaux de la composante $\overline{u'' v''}$	. 142
VI.19	Profils transversaux de la composante $\overline{u'' w''}$	. 142
VI.20	Profils transversaux de la composante $\overline{v'' w''}$	. 143
VI.21	Comparaison des profils transversaux de $\overline{\tau}$ pour les deux approches en $Z=2D_{col}$	. 143
VI.22	Profils transversaux de la surface volumique $\overline{\Sigma}$	. 144
VI.23	Profils transversaux du rayon moyen $r$ des gouttes $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	. 145
VI.24	Comparaison des profils transversaux des rayons moyen $r$ et d'équilibre théorique $r_{eq}$	
	des gouttes en $Z = 2 D_{col}$	. 146
VI.25	Comparaison des profils des contributions $a$ en $Z = 2 D_{col}$	. 147

VI.26	Comparaison des profils des contributions $a$ en $Z = 5 D_{col}$	.47
VI.27	Profils transversaux du rayon moyen $r$ des gouttes en $Z = 2 D_{col}$ (calcul 1) 1	48
VI.28	Profils transversaux du rayon moyen $r$ des gouttes en $Z = 2 D_{col}$ (calcul 2) 1	48
VI.29	Profils transversaux du rayon moyen $r$ des gouttes en $Z = 2 D_{col}$ (calcul 3) 1	49
VI.30	Comparaison des profils des contributions $a$ et $A$ en $Z = 2 D_{col}$	50
VI.31	Comparaison des contributions $A$ en $Z = 2 D_{col}$	.50
VI.32	Comparaison des profils de la surface liquide moyenne obtenus avec et sans la nouvelle	
	modélisation de $A$ en $Z = 2 D_{col}$	51
VI.33	Comparaison des profils des termes de la nouvelle modélisation de $A$ en $Z = 2 D_{col}$ . 1	51
VI.34	Comparaison des profils des termes de la nouvelle modélisation de $A$ en $Z = 2 D_{col}$ . 1	52
VI.35	Profils transversaux de la surface volumique $\overline{\Sigma}$ pour 5 et 15 bars $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	52
VI.36	Profils transversaux du rayon moyen $r$ des gouttes pour 5 et 15 bars $\ldots \ldots \ldots \ldots 1$	53
VI.37	Profils transversaux du rayon moyen $r$ avec ou sans surfactant $\ldots \ldots \ldots$	53
VI.38	Influence de la constante $\alpha_0$ sur le profil transversal du rayon moyen des gouttes r en	
	$Z = 2 D_{col} \qquad \dots \qquad $	54
VI.39	Profils des contributions A, a et $\frac{\partial \tilde{u}}{\partial u}$	55
VI.40	Influence de la constante $\alpha'_0$ sur le profil transversal du rayon moyen des gouttes r en	
	Z = 2 D col	56
VI.41	Influence de la constante $C$ sur le profil transversal du rayon moyen des gouttes $r$ en	
	Z = 2 D col	56
VI.42	Tracé de la fonction de répartition du rayon moyen $r$ des gouttes produites $\ldots \ldots 1$	57
VI.43	Tracé de la fonction de répartition du flux $(\overline{\rho}  \widetilde{u}  \widetilde{Y}  ds)$	58
VI.44	Dispositif expérimental	59
VI.45	Comparaison des profils transversaux de la fraction volumique	59
VI.46	Comparaison des profils transversaux du module de vitesse	.61
VI.47	Comparaison des profils transversaux du Diamètre Moyen de Sauter	62
VI.48	Profils transversaux du Diamètre Moyen de Sauter avec la nouvelle tentative de mo-	
	délisation	.63
A.1	Champ de la masse volumique moyenne	73
A.2	Champ de l'énergie cinétique turbulente $\widetilde{k}$	74
B.1		76
B.2		77

### Bibliographie

- [1] Eurostat FAO 2000. Production agricole française en milliers de tonnes (milliers hl pour le vin). Agriculture : les enjeux pour l'avenir.
- [2] D. Adalsteinsson and J. Sethian. The fast construction of extension velocities in level set methods. J. Comput. Phys, 148 :2–22, 1998.
- [3] Agreste. Répartition du territoire en 2004. L'agriculture en France et en Europe.
- [4] A. Alajbegovic, H.A. Grogger, and H. Philipp. An eulerian modeling of primary atomization in coaxial injectors. In : Seventh Annual Conference Computational Fluid Dynamics Society of Canada, 1999. 53, Canada.
- [5] C. Arcoumanis, M. Gavaises, and B. French. Effect of fuel injection processes on the structure of diesel sprays. Technical Report 970799, SAE paper, 1997.
- [6] ASQAB, ARPAM, and Région ADEME de Franche-Comté. Les pesticides dans l'air franc-comtois. Atmo Novembre 2005, 2005.
- [7] J.N. Aubertot, J.M. Barbier, A. Carpentier, J.J. Gril, L. Guichard, P. Lucas, S. Savary, I. Savini, and M. Voltz (éditeurs). Pesticides, agriculture et environnement. réduire l'utilisation des pesticides et limiter leurs impacts environnementaux. Technical report, Rapport d'expertise scientifique collective, INRA et Cemagref (France), 2005.
- [8] P. Bailly, M. Champion, and D. Garréton. Counter-gradient diffusion in a confined turbulent premixed flame. *Phys. Fluids.*, 9 :766–775, 1996.
- [9] J.M. Ballester and C. Dopazo. Drop size measurement in heavy oil sprays from pressure-swirl nozzles. Atom. and. Sprays, 6:377–408, 1996.
- [10] L. Ben, A. Vallet, and B. Bonicelli. Atomisation of agricultural sprays : influence of some liquid properties. In : Nineteenth International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, 2004, Nottingham, Royaume-Uni.
- [11] A. Benkenida. Développement et validation d'une méthode de simulation d'écoulements diphasiques sans reconstruction d'interfaces. Application à la dynamique des bulles de Taylor. PhD thesis, INP Toulouse, 1999.
- [12] R. Borghi. Turbulent combustion modelling. Prog. Energy Combust. Sci., 14:1–43. 57, 1988.
- [13] J. Boussinesq. Théorie des écoulements tourbillonnaires. C.R.A.S., 23, 1976.
- [14] R. Brown and M.M. Sidahmed. Simulation of spray dispersal and deposition from a forestry airblast sprayer - part ii : Droplet trajectory model. *Trans. ASAE*, 44 :11– 17, 2001.
- [15] S. Cadalen. Ecoulement interne d'une buse de pulvérisation agricole. Technical report, CEMAGREF, 2004.

- [16] R.A. Castleman. The mechanism of atomization accompanying solid injection. Technical Report 440, NACA Report, 1932.
- [17] CORPEN. Fiche ii le choix et l'entretien du pulvérisateur juillet 2006.
- [18] J. Cousin, W.N. Ren, and S. Nally. Dispersion of sprays in solid injection oil engines. *Trans. ASME*, 53 :65, 1931.
- [19] J. Cousin, W.N. Ren, and S. Nally. Recent developments in simulations of internal flows in high pressure swirl injectors. *Oil. and. Gas Sci. and Tech. Rev. IFP*, 2 :227– 231, 1999.
- [20] J. Cousteix. Turbulence et couche limite, 1989.
- [21] M. Cruchaga, D. Celentano, and T. Tezduyar. A moving lagrangian interface technique for flow computations over fixed meshes. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng*, 191 :525–543, 2001.
- [22] B. Daly. Numerical study of two fluid rayleigh-taylor instability. Phys. Fluids, 10:297–307, 1967.
- [23] B. Daly. A technique for including surface tension effect in hydrodynamics calculation. Comput. Phys, 4 :97–117, 1969.
- [24] B.J. Daly and F.H. Harlow. Transport equations in turbulence. Phys. Fluids., 13:2634–2649, 1970.
- [25] A. Datta and S.K. Som. Numerical prediction of air core diameter, coefficient of discharge and spray cone angle of a swirl spray pressure nozzle. Int. J. Heat Fluid Flow, 1999.
- [26] Institut Français de l'environnement. Les pesticides dans les eaux : données 2003 et 2004. Numéro 05 Août 2006.
- [27] F.X. Demoulin and R. Borghi. Modélisation des écoulements turbulents avec fortes variations de masse volumique. *Rapport SNECMA*, Décembre 2001.
- [28] N. Dumont, O. Simonin, and C. Habchi. Numerical simulation of cavitating flows in diesel injectors by a homogeneous equilibrium modeling approach. In : CAV 2001 : Fourth International Symposium on Cavitation, June 20-23, 2001, California Institute of Technology, Pasadena, CA USA.
- [29] M.C. Butler Ellis, C.R. Tuck, and P.C.H. Miller. The effect of some adjuvants on sprays produced by agricultural flat fan nozzles. *Crop protection*, 16:41–50, 1997.
- [30] G.M. Faeth. Structure and atomization properties of dense turbulent sprays. In : Twenty-third Symposium (International) Combustion, 1990, Université d'Orléans, France.
- [31] H. Ganzelmeier, D. Rautmann, R. Spangenberg, and M. Streloke. Studies on spray drift of plant protection products. In : Mitteilungen aus der Biologischen Bundesanstalt für Land-und Forstwirtschaft, 1995, Dahlem, Berlin.
- [32] M. Gavaises. Modeling of Diesel fuel injection processes. PhD thesis, Imperial College, Londres, Royaume-uni, 1997.
- [33] M.M. Gibson and B.E. Launder. Ground effects on pressure fluctuations in the atmospheric boundary layer. J. Fluid. Mech., 86:491–511, 1978.

- [34] S. Gluck. Mesure de concentration, de dimension et de vitesse de gouttes par sondes optiques de détection de phases sur l'injecteur du cemagref. Technical report, A2 Photonic Sensors, 2007.
- [35] D. Gueyffier and S. Zaleski. Full navier-stokes simulations of droplet impact on thin liquid films. In : Third International Conference on Multiphase Flow. ICMF'98., 1998, Lyon, France.
- [36] C. Habchi, D. Verhoeven, C. Huynh Huu, L. Lambert, J.L. Vanhemelryck, and T. Baritaud. Modeling atomization and break-up in high-pressure diesel sprays. Technical Report 970881, SAE paper, 1997.
- [37] G. Hermann and A. Michalke. On the inviscid stability of a circular jet with external flow. J. Fluid. Mech., 114 :343–359, 1982.
- [38] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid vof method for dynamics of free boundaries. J. Comput. Phys, 39 :201–225, 1981.
- [39] K.Y. Huh and A.D. Gosman. A phenomenological model of diesel spray atomization. In : Proc. Int. Conf. on Multiphase flow, 1991, Tsukuba, Japon, pages 271–276.
- [40] M. Ishii. Thermo-fluid dynamic theory of two phase flow, 1975.
- [41] S. Jay. Modélisation de la combustion diphasique au moyen de bilans d'aire interfaciale et de surface de flamme. Application à la combustion cryotechnique. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2002.
- [42] S. Jay, F. Lacas, and S. Candel. An eulerian modeling of primary atomization in coaxial injectors. In : Seventeenth Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems. ETH., 2001, Zürich, Suisse.
- [43] I. Kataoka. Local instant formulation of two-phase flow. Int. J. Multiph. Flow, 12 (5):745–758, 1986.
- [44] A. Kauffman. Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler-Euler des écoulements réactifs diphasiques. PhD thesis, INP Toulouse, 2004.
- [45] T. Kawamura and Y. Kodama. Numerical simulation method to resolve interactions between bubbles and turbulence. Int. J. Heat Fluid Flow, 23:627–638, 2002.
- [46] H. V. Kuhnlein. Benefits and risks of traditional food for indigenous peoples : focus on dietary intakes of arctic men. Can. J. Physiol. Pharmacol., 73 :749–771, 1995.
- [47] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. J. Comput. Phys, 113 :134– 147. 58, 1994.
- [48] L. Lambert. Modélisation des jets d'injection haute pression des moteurs Diesel et validation expérimentale. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1996.
- [49] B.E. Launder. On the effect of gravitational field on the turbulent transport of heat and momentum. J. Fluid. Mech, 67 :569–581, 1975.
- [50] D. Legendre. Quelques aspects des forces hydrodynamiques et des transferts de chaleur sur une bulle sphérique. PhD thesis, INP Toulouse, 1996.
- [51] V.G. Levich. Physicochemical hydrodynamics, 1962.
- [52] D. Lhuillier, C. Morel, and J.M. Delhaye. Interfacial area balance in a two-phase mixture : local formulation vs particulate approach. *Comptes rendus de l'Académie* des sciences. Série IIb, mécanique, physique, astronomie, 328 (2) :143–149, 2000.

- [53] X. Li. Mechanisms of atomization of a liquid jet. Atom. and. Sprays, 5 :89–105, 2005.
- [54] F.S. Lien and M.A. Leschziner. Assessment of turbulent transport models including non-linear rng eddy-viscosity formulation and second-moment closure. *Computers* and Fluids., 23(8) :983–1004, 1994.
- [55] A.B. Liu and R.D. Reitz. Mechanisms of air-assisted liquid atomization. Atom. and. Sprays, 3:55–75, 1993.
- [56] J.L. Lumley. Modelling turbulent flux of passive scalar quantities in inhomogeneous flows. *Phys. Fluids*, 18 :619–621, 1975.
- [57] A. Mansour and N. Chigier. Effect of turbulence on the stability of liquid jets and resulting droplet size distribution. Atom. and. Sprays, 4:583–604, 1994.
- [58] T. Mantel and R. Borghi. A new model of premixed wrinkled flame based on a scalar dissipation equation. *Combust. and Flame*, 96 :443–457, 1994.
- [59] F.E. Marble and J.E. Broadwell. The coherent flame model for turbulent chemical reactions. Tech report trw-9-pv, 1977, Project Squid Headquarters, Chaffee Hall, Purdue University.
- [60] R. Marcer and J.M. Le Gouez. Simulation of unsteady cavitating flows in diesel injector with an improved vof method. In : Seventeenth Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems. ETH., 2001, Zürich, Suisse.
- [61] F. Maroteaux. Liquid film atomization on wall edges-separation criterion and droplets formation model. J. Fluids. Eng, 124 :565–575, 2002.
- [62] P.C.H. Miller and M.C. Butler Ellis. Effects of formulation on spray nozzle performance for applications from ground-based boom sprayers. *Crop protection*, 19:609– 615, 2000.
- [63] H. HA Minh. La turbulence en mécanique des fluides : aspects physiques, modélisation et simulation numérique. In : Ecole de printemps d'oléron, 1987, France.
- [64] T. Miyamoto and T. Kobayashi. Structure of sprays from an air assist hollow-cone injector. Technical Report 9600771, SAE paper, 1996.
- [65] C. Morel. Modélisation multidimensionnelle des écoulements diphasiques gaz-liquide. Application à la simulation des écoulements à bulles ascendants en conduite verticale. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1997.
- [66] W. Mulder, S. Osher, and J.A. Sethian. Computing interface motion in compressible gaz dynamics. J. Comput. Phys, 100 :209–228, 1992.
- [67] J.A. Nicholls. Stream and droplet breakup by shock waves. NASA SP-194, pages 126–128. 40, 1972.
- [68] A. Nishimura and D.N. Assanis. A model for primary diesel fuel atomization based on cavitation bubble collapse ennergy. In : Eight International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, 2000, California Institute of Technology, Pasadena, CA USA.
- [69] P.J. O'Rourke and A.A. Amsden. The tab method for numerical calculation of spray droplet breakup. Technical Report 872089, SAE paper, 1987.
- [70] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on hamilton-jacobi formulations. J. Comput. Phys, 79 :12–49. 58, 1988.

- [71] Sung Wook Park1 and Chang Sik Lee. Investigation of atomization and evaporation characteristics of high-pressure injection diesel spray using kelvin-helmholtz instability/droplet deformation and break-up competition model. *Proc. Instn. Mech. Engrs*, 218 (D), 2004.
- [72] M.A. Patterson and R.D. Reitz. Modeling the effects of fuel spray characteristics on diesel engine combustion and emission. Technical Report 980131, SAE paper, 1998.
- [73] M. Pilch and C.A. Erdman. Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced brekup of a liquid drop. Int. J. Multiph. Flow, 13:741–757, 1987.
- [74] R.D. Reitz. Atomization and other break-up regimes of a liquid jet. PhD thesis, Princeton University USA, 1978.
- [75] R.D. Reitz. Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. Atom. Spray Tech, 3:309–337, 1987.
- [76] R.D. Reitz and F.V. Bracco. Mechanisms of breakup of round liquid jets. Encyclopedia Fluid Mech, pages 233–249, 1986.
- [77] R.D. Reitz and R. Diwakar. Effect of drop break-up on fuel sprays. Technical Report 860469, SAE paper, 1986.
- [78] R.D. Reitz and R. Diwakar. Structure of high-pressure fuel sprays. Technical Report 870598, SAE paper, 1987.
- [79] W. Rodi. Counter-gradient diffusion in a confined turbulent premixed flame. ZAMM, 56 :219–221, 1976.
- [80] J.C. Rotta. Statistiche theorie nicht homogener turbulenz. Zeitschrift Physik, 129:547–572, 1951.
- [81] J.H. Rupe. On the dynamic characteristics of free-liquid jets and a partial correlation with orifice geometry. Technical Report 870598, Technical Report 32, J.P.L., 1962.
- [82] G. Ryskin and L.G. Leal. Numerical solution of free-boundary problems in fluid mechanics. J. Fluid. Mech, 148:245–292. 54, 1984.
- [83] P.G. Saffman and J.S. Turner. On the collision of drops in turbulent clouds. Communication, 1955.
- [84] S. Sanson. Typologie des produits phytosanitaires utilisés et leur devenir. Magazine Les Phytosanitaires Septembre 2000, 2000.
- [85] R. Saurel and R. Abgrall. A multiphase godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. J. Comput. Phys, 150 :425–467. 53, 1999.
- [86] R. Saurel and R. Abgrall. A multiphase godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. SIAM. J. Sci. Comput, 21 :1115–1145. 53, 1999.
- [87] R. Schiestel. Modélisation et simulation des écoulements turbulents, 1993.
- [88] P.H. Schweitzer. Mechanism of disintegration of liquid jets. J. Appl. Phys, 8:513– 521, 1937.
- [89] X. Silvani, A. Stoukov, and D. Vandromme. Simulation numérique d'une zone de mélange temporelle avec forts gradients de masse volumique. *Combustion in press*, 2002.

- [90] O. Simonin. Prediction of the dispersed phase turbulence in particle-laden jets. In : Fourth International Symposium on gas-solid flows. ASME FED, 1991.
- [91] J. Soulas. Modélisation et simulation de la pulvérisation d'un jet liquide. Application à l'injection directe essence. PhD thesis, INP Toulouse, 2002.
- [92] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. J. Comput. Phys, 114 :146–159. 59, 1994.
- [93] G.I. Taylor. In : The shape and acceleration of a drop in a high speed air stream. Cambridge University Press, 1963.
- [94] M.E. Teske and H.W. Thistle. A simulation of release height and wind speed effects for drift minimization. *Trans. ASAE*, 42 :583–591, 1999.
- [95] A. Theodorakakos and G. Bergeles. Simulation of sharp gas-liquid interface using vof method and adaptative grid local refinement around the interface. Int. J. Numer. Meth. Fluids, 45:421–439. 58, 2004.
- [96] A. Trouvé and T. Poinsot. The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion. J. Fluid. Mech, 278 :1–31, 1994.
- [97] B. Truchot, A. Benkenida, and J. Magnaudet. An eulerian approach for spray modelling in internal combustion engines. In : Nineteenth International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, 2004, Nottingham, Royaume-Uni.
- [98] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N.A. Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.J. Jan. A front tracking method for the computations of multiphase flow. J. Comput. Phys, 169 :708–759, 2001.
- [99] S.O. Unverdi and G. Tryggvason. A front tracking method for viscous, incompressible multi fluid flow. J. Comput. Phys, 100 :25–37, 1992.
- [100] A. Vallet. Contribution à la modélisation de l'atomisation d'un jet liquide haute pression. PhD thesis, Université de Rouen, 1997.
- [101] A. Vallet and R. Borghi. An eulerian model of atomization of a liquid jet. In : Third International Conference on Multiphase Flow, 1998, Lyon, France.
- [102] A. Vallet, A.A. Burluka, and R. Borghi. Development of an eulerian model for the atomization of a liquid jet. Atom. and. Sprays, 11:619–642, 2001.
- [103] D. Vandromme. Contribution à la modélisation et à la prédiction d'écoulements turbulents à masse volumique variable. PhD thesis, Université des Sciences et Techniques de Lille, 1983.
- [104] K.L. Weiner and C.S. Parkin. The use of computational dynamic code for modelling spray from a mistblower. J. agric. Eng Res., 55 :313–324, 1993.
- [105] J.E. Welch, F.H. Harlow, J.P. Shannon, and B.J. Daly. The mac method. a computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluid-flow problems involving free surface. *Report LA-3425, 1965, Los Alamos Scientific Laboratory,* University of California, New Mexico.
- [106] Q. Zhou, P.C.H. Miller, P.J. Walklate, and N.H. Thomas. Prediction of spray angle from flat fan nozzle. J. agric. Eng Res., 64 :139–148, 1996.