









Modélisation et simulation de l'atomisation secondaire et de la vaporisation turbulente. Application à la combustion cryotechnique.

Emmanuel BODÈLE

Centre National de la Recherche Scientifique Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs

26 mai 2004

Contexte de l'étude Objectifs de l'étude

- Contexte de l'étude
 Objectifs de l'étude
- L'atomisation secondaire
 - Description du processus-Principaux paramètres
 - Modélisation de l'atomisation secondaire
 - Validation du modèle de cassure secondaire
 - > Simulations du banc d'essai MASCOTTE

- Objectifs de l'étude
- L'atomisation secondaire
 - Description du processus-Principaux paramé
 - Modélisation de l'atomisation secondaire
 - Validation du modèle de cassure secondaire
 - ▶ Simulations du banc d'essai MASCOTTE
- La vaporisation turbulente
 - Description du processus-Principaux paramètres
 - Modélisation de la vaporisation turbulente
 - Simulations de la vaporisation turbulente

- Contexte de l'étude
- Objectifs de l'étude
- L'atomisation secondaire
 - Description du processus-Principaux paramet
 - Modélisation de l'atomisation secondaire
 - Validation du modèle de cassure secondaire
 - Simulations du banc d'essai MASCOTTE
- La vaporisation turbulente
 - Description du processus-Principaux paramètres
 - ▶ Modélisation de la vaporisation turbulente
 - Simulations de la vaporisation turbulente
 - Conclusions et perspectives

- Contexte de l'étude
- Objectifs de l'étude
- L'atomisation secondaire
 - Description du processus-Principaux paramètries
 - Modélisation de l'atomisation secondaire
 - Validation du modèle de cassure secondaire
 - ▶ Simulations du banc d'essai MASCOTTE
- La vaporisation turbulente
 - Description du processus-Principaux paramètres
 - ▶ Modélisation de la vaporisation turbulente
 - Simulations de la vaporisation turbulente
- Conclusions et perspectives

Échecs des lanceurs ARIANE 3 (V15 en 1985) et ARIANE 2 (V18 en 1986)

- Échecs des lanceurs ARIANE 3 (V15 en 1985) et ARIANE 2 (V18 en 1986)
- Nécessité de comprendre les processus élémentaires se déroulant dans la chambre de combustion d'un moteur-fusée à ergols liquides

- Échecs des lanceurs ARIANE 3 (V15 en 1985) et ARIANE 2 (V18 en 1986)
- Nécessité de comprendre les processus élémentaires se déroulant dans la chambre de combustion d'un moteur-fusée à ergols liquides
- Réduire les coûts et les délais de développement

- Échecs des lanceurs ARIANE 3 (V15 en 1985) et ARIANE 2 (V18 en 1986)
- Nécessité de comprendre les processus élémentaires se déroulant dans la chambre de combustion d'un moteur-fusée à ergols liquides
- Réduire les coûts et les délais de développement
- Développement du lanceur ARIANE 5 (moteur cryotechnique VULCAIN)

- Échecs des lanceurs ARIANE 3 (V15 en 1985) et ARIANE 2 (V18 en 1986)
- Nécessité de comprendre les processus élémentaires se déroulant dans la chambre de combustion d'un moteur-fusée à ergols liquides
- Réduire les coûts et les délais de développement
- Développement du lanceur ARIANE 5 (moteur cryotechnique VULCAIN)

Création du Groupe de Recherche « *Combustion dans les Moteurs- Fusées* » (1993), unissant le CNES, la SNECMA, l'ONERA et le CNRS

Études entreprises au cours du GdR

- Combustion à forte variation de densité
- Techniques de mesures en combustion
- Cinétique chimique H₂-O₂
- Dispersion de brouillards denses
- Évaporation de gouttes en milieu turbulent
- Combustion de gouttes isolées
- Combustion de gouttes en interaction
- Rupture aérodynamique de gouttes et jets
- Développement des outils de simulation numérique
- Développement du banc d'essai MASCOTTE



Études entreprises au cours du GdR

Évaporation de gouttes en milieu turbulen
Rupture aérodynamique de gouttes et jets

Travaux en partie effectués au LCSR

Caractérisation complète du processus de vaporisation d'une goutte isolée dans un environnement turbulent (Birouk, LCSR, 1996)

Études entreprises au cours du GdR

Évaporation de gouttes en milieu turbulen
Rupture aérodynamique de gouttes et jets

Travaux en partie effectués au LCSR

Caractérisation complète du processus de vaporisation d'une goutte isolée dans un environnement turbulent (Birouk, LCSR, 1996)

Caractérisation complète du processus de cassure d'une goutte cryogénique soumise à un écoulement sous haute pression et à haute vitesse (Vieille, LCSR, 1998)

Études entreprises au cours du GdR

Évaporation de gouttes en milieu turbulen
Rupture aérodynamique de gouttes et jets

Travaux en partie effectués au LCSR

Caractérisation complète du processus de vaporisation d'une goutte isolée dans un environnement turbulent (Birouk, LCSR, 1996)

Caractérisation complète du processus de cassure d'une goutte cryogénique soumise à un écoulement sous haute pression et à haute vitesse (Vieille, LCSR, 1998)

Deux bases de données précises

- Contexte de l'étude
- Objectifs de l'étude
- L'atomisation secondaire
 - Description du processus-Principaux paramétries
 - Modélisation de l'atomisation secondaire
 - Validation du modèle de cassure secondaire
 - ▶ Simulations du banc d'essai MASCOTTE
- La vaporisation turbulente
 - Description du processus-Principaux paramètres
 - Modélisation de la vaporisation turbulente
 - Simulations de la vaporisation turbulente
- Conclusions et perspectives

Ē

Élaborer à partir de ces bases de données des modèles d'atomisation secondaire et de vaporisation turbulente

- Élaborer à partir de ces bases de données des modèles d'atomisation secondaire et de vaporisation turbulente
 Les implanter dans des codes de calcul issus des
 - recherches menées au cours du GdR
 - THÉSÉE (code SNECMA) pour le modèle de cassure secondaire
 - MSD (code ONERA) pour le modèle de vaporisation turbulente

- Élaborer à partir de ces bases de données des modèles d'atomisation secondaire et de vaporisation turbulente
- Les implanter dans des codes de calcul issus des recherches menées au cours du GdR
 - THÉSÉE (code SNECMA) pour le modèle de cassure secondaire
 - MSD (code ONERA) pour le modèle de vaporisation turbulente
- Les utiliser sur des configurations simples (pour contrôler le comportement des modèles dans les codes)

- Élaborer à partir de ces bases de données des modèles d'atomisation secondaire et de vaporisation turbulente
- Les implanter dans des codes de calcul issus des recherches menées au cours du GdR
 - THÉSÉE (code SNECMA) pour le modèle de cassure secondaire
 - MSD (code ONERA) pour le modèle de vaporisation turbulente
- Les utiliser sur des configurations simples (pour contrôler le comportement des modèles dans les codes)
- Les utiliser sur la configuration MASCOTTE et comparer les résultats aux bases de données expérimentales de combustion diphasique cryotechnique issues du GdR

L'atomisation secondaire

- Contexte de l'étude
 Objectifs de l'étude
- L'atomisation secondaire
 - Description du processus-Principaux paramètres
 - Modélisation de l'atomisation secondaire
 - Validation du modèle de cassure secondaire
 - Simulations du banc d'essai MASCOTTE
- La vaporisation turbulente
 - Description du processus-Principaux paramètres
 - Modélisation de la vaporisation turbulente
 - Simulations de la vaporisation turbulente

Conclusions et perspectives





processus élémentaires :

Atomisation primaire : déstabilisation de l'interface liquide-gaz, générant des fragments de « grandes dimensions » et de formes variées (ligaments, gouttes déformées...)



Régime d'atomisation d'un jet liquide décomposé en deux processus élémentaires :

- Atomisation primaire : déstabilisation de l'interface liquide-gaz, générant des fragments de « grandes dimensions » et de formes variées (ligaments, gouttes déformées...)
- Atomisation secondaire : cassure des parcelles liquides issues de l'atomisation primaire pour former un brouillard de fines gouttelettes

Principaux paramètres caractéristiques

Nombre de Weber

$$We = \frac{force \ aérodynamique}{force \ de \ tension \ superficielle}$$

 \cap

Principaux paramètres caractéristiques

Nombre de Weber

$$We = \frac{\rho_g D \left(U_g - U_l \right)^2}{\sigma}$$

0

Principaux paramètres caractéristiques

Nombre de Weber $\rho_a D (U_a - U_l)^2$

$$We = \frac{\rho_g D \left(U_g - U_l \right)^{-1}}{\sigma}$$

Nombre de Reynolds

$$Re = \frac{force \ aérodynamique}{force \ de \ viscosité \ du \ gaz}$$

Principaux paramètres caractéristiques

Nombre de Weber $We = \frac{\rho_g D \left(U_g - U_l\right)^2}{\sigma}$

Nombre de Reynolds

$$Re = \frac{\rho_g D \left| U_g - U_l \right|}{\mu_g}$$

Principaux paramètres caractéristiques

Nombre de Weber $We = \frac{\rho_g D (U_g - U_l)^2}{\sigma}$

Nombre de Reynolds

$$Re = \frac{\rho_g D \left| U_g - U_l \right|}{\mu_g}$$

Nombre d'Ohnesorge

 $Oh = \frac{force \ de \ viscosit\acute{e} \ du \ liquide}{\left(force \ a\acute{e}rodynamique \cdot force \ de \ tension \ superficielle\right)^{1/2}}$

Principaux paramètres caractéristiques

Nombre de Weber $We = \frac{\rho_g D \left(U_g - U_l\right)^2}{\sigma}$

Nombre de Reynolds

$$Re = \frac{\rho_g D \left| U_g - U_l \right|}{\mu_g}$$

Nombre d'Ohnesorge

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \, D \, \sigma}}$$

L'atomisation secondaire (Shraiber et al., 1996)



0

Transitions entre les régimes de fragmentation

- Existence d'un nombre de Weber critique de cassure
 - Pilch et Erdman (1987), Brodkey (1969)

 $We_c = 12 \left(1 + 1,077 Oh^{1,6} \right)$

Transitions entre les régimes de fragmentation

- Existence d'un nombre de Weber critique de cassure
 - Pilch et Erdman (1987), Brodkey (1969)

 $We_c = 12 \left(1 + 1,077 Oh^{1,6} \right)$

Transitions entre les régimes de cassure

Taylor (1934)
$$\frac{We}{\sqrt{Re}} = 0,503$$

Gelfand (1996) pour 0,1 MPa < P < 5 MPa : $\frac{We}{\sqrt{Re}} = A(P) = 1.5 \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0.25} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g}\right)^{-0.5}$

Les temps caractéristiques

Pilch et Erdman (1987)

Temps d'initiation de la cassure (Oh > 0,1)

 $T_{ini} = 1.9 \left(We - 12 \right)^{-0.25} \left(1 + 0.22 Oh^{1.6} \right)$


Processus d'atomisation

Les temps caractéristiques

Pilch et Erdman (1987)

- Temps d'initiation de la cassure (Oh > 0,1) $T_{ini} = 1.9 (We - 12)^{-0.25} (1 + 0.22 Oh^{1.6})$
 - Temps total de cassure



Processus d'atomisation

Les temps caractéristiques

Pilch et Erdman (1987)

- **Temps d'initiation de la cassure** (Oh > 0,1) $T_{ini} = 1.9 (We - 12)^{-0.25} (1 + 0.22 Oh^{1.6})$
- Temps total de cassure

 $\begin{cases} T_{total} = 6 (We - 12)^{-0.25} & \text{pour} & 12 \le We \le 18\\ T_{total} = 2.45 (We - 12)^{0.25} & \text{pour} & 18 \le We \le 45\\ T_{total} = 14.1 (We - 12)^{-0.25} & \text{pour} & 45 \le We \le 351\\ T_{total} = 0.766 (We - 12)^{0.25} & \text{pour} & 351 \le We \le 2670\\ T_{total} = 5.5 & \text{pour} & We \ge 2670 \end{cases}$

Processus d'atomisation

Les temps caractéristiques

Pilch et Erdman (1987)

- **Temps d'initiation de la cassure** (Oh > 0,1) $T_{ini} = 1.9 (We - 12)^{-0.25} (1 + 0.22 Oh^{1.6})$
- Temps total de cassure

 $\begin{cases} T_{total} = 6 (We - 12)^{-0.25} & \text{pour} & 12 \le We \le 18\\ T_{total} = 2.45 (We - 12)^{0.25} & \text{pour} & 18 \le We \le 45\\ T_{total} = 14.1 (We - 12)^{-0.25} & \text{pour} & 45 \le We \le 351\\ T_{total} = 0.766 (We - 12)^{0.25} & \text{pour} & 351 \le We \le 2670\\ T_{total} = 5.5 & \text{pour} & We \ge 2670 \end{cases}$

 $T_{total} = 4.5 (1 + 1.2 Oh^{1.64})$ pour We < 228 et Oh > 0.1



Conditions expérimentales explorées

- Modélisation basée sur les expériences de Vieille (1998)
 - ► Goutte d'oxygène liquide en chute libre dans un écoulement d'hélium à grande vitesse $(V_{\text{max}} = 37 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1})$ et sous haute pression
 - $(P_{\rm max} = 8 \text{ MPa} > P_{\rm crO_2} = 5,09 \text{ MPa})$
 - Rapport de densité DR de 63 à 6300
 - \triangleright We_{max} = 180, Re_{max} = 3300, Oh_{max} = 1,4×10⁻²
 - Caractérisation complète du processus de cassure
 - Obtention de données qualitatives (modes de cassure) et quantitatives (temps caractéristique de la cassure, distributions des gouttes secondaires)







Transitions entre les régimes de cassure

$$\frac{We}{\sqrt{Re}} = C \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0.25} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g}\right)^{-0.5}$$

Transitions entre les régimes de cassure

$$\frac{We}{\sqrt{Re}} = C \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0.25} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g}\right)^{-0.5}$$

Régime de cassure	C
pas de cassure	< 0,25
cassure en sac	0,25-0,7
cassure transitionnelle	0,7-0,9
cassure par cisaillement	>0,9

Temps d'initiation de la cassure

$$T_{ini} = 0.75 \, \frac{D_0}{U} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \, W e^{-0.06}$$

Temps d'initiation de la cassure

$$T_{ini} = 0.75 \, \frac{D_0}{U} \, \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \, W e^{-0.06}$$

Faible influence du nombre de Weber

Temps d'initiation de la cassure

$$T_{ini} = 0.75 \, \frac{D_0}{U} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \, W e^{-0.06}$$

□ Faible influence du nombre de Weber

 Temps de normalisation (conservation de la quantité de mouvement à l'interface)



- Résultats expérimentaux
- Utilisation des histogrammes
 - Souttes dans les classes inférieures \Rightarrow cassure



- Résultats expérimentaux
- Utilisation des histogrammes
 - Souttes dans les classes inférieures \Rightarrow cassure
 - Détermination du nombre et du diamètre des gouttes



- Résultats expérimentaux
- Utilisation des histogrammes
 - Souttes dans les classes inférieures \Rightarrow cassure
 - > Détermination du nombre et du diamètre des gouttes
 - Répartition en classes simplifiées (10, 30 et 50 % du diamètre de la goutte initiale)

- Résultats expérimentaux
- Utilisation des histogrammes
 - Souttes dans les classes inférieures \Rightarrow cassure
 - Détermination du nombre et du diamètre des gouttes
 - Répartition en classes simplifiées (10, 30 et 50 % du diamètre de la goutte initiale)
 - Moyenne du nombre de gouttes par classe simplifiée

- Résultats expérimentaux
- Utilisation des histogrammes
- Distributions simplifiées des gouttes secondaires :

	Pourcentage du diamètre de la goutte initiale		
Régime	10 %	30 %	50 %
Cassure en sac	2	2	1
Cassure transitionnelle	3	1	1
Cassure par cisaillement	4	2	2

Distributions des gouttes secondaires

- Résultats expérimentaux
- Utilisation des histogrammes
- Distributions simplifiées des gouttes secondaires :

	Pourcentage du diamètre de la goutte initiale		
Régime	10 %	30 %	50%
Cassure en sac	2	2	1
Cassure transitionnelle	3	1	1
Cassure par cisaillement	4	2	2

■ Masse conservée \Rightarrow ajustement du diamètre initial

Régime	Résidus de la goutte initiale	
Cassure en sac	93,60 %	
Cassure transitionnelle	94,50 %	
Cassure par cisaillement	86,20 %	

Organigramme du modèle d'atomisation secondaire

La goutte est-elle déjà dans un mode de cassure ?












Présentation du code THÉSÉE (code SNECMA)

- Code basé sur la méthode des volumes finis
- Méthodes temporelles d'ordre 2
- Méthodes spatiales d'ordre 2 avec différents limiteurs
- Aérodynamique figée ou calculée, compressible ou incompressible
- Calculs mono ou multi-espèces
- Thermodynamique constante ou variable
- Loi des gaz parfaits ou réels
- Combustion : EBU, Arrhenius, PEUL, utilisateur...
- Domaines de calcul 3D non structurés
- Turbulence : modèle k- ε de Jones-Launder,

Smagorinsky...

Présentation du code THÉSÉE (code SNECMA) Phase dispersée

- Calculs multiphasiques avec une approche Eulérienne ou Lagrangienne
- Introduction surfacique ou ponctuelle des particules (routine utilisateur dédiée)
- Particules à thermodynamique constante ou variable, inertes ou évaporantes (modèle de Sirignano avec ou sans arrachement de micro-gouttelettes ; modèle de goutte sphérique en régime saturé ou non...)
- Dispersion turbulente des particules
- Couplage avec la phase gazeuse

Intégration du modèle de cassure dans THÉSÉE

 Modèle de cassure intégré dans THÉSÉE par l'intermédiaire du module diphasique Lagrangien (accès aux caractéristiques des gouttes plus aisé)

Intégration du modèle de cassure dans THÉSÉE

 Modèle de cassure intégré dans THÉSÉE par l'intermédiaire du module diphasique Lagrang (accès aux caractéristiques des gouttes plus ais

Modèle de cassure : génération de nouvelles trajectoires
 « numériques » en cours de calcul

Intégration du modèle de cassure dans THÉSÉE

- Modèle de cassure intégré dans THÉSÉE par l'intermédiaire du module diphasique Lagrang (accès aux caractéristiques des gouttes plus ais)
 - Modèle de cassure : génération de nouvelles trajectoires
 « numériques » en cours de calcul
 - Nombre de trajectoires « numériques » limité

Intégration du modèle de cassure dans THÉSÉE

- Modèle de cassure intégré dans THÉSÉE par l'intermédiaire du module diphasique Lagrangi (accès aux caractéristiques des gouttes plus aisé
- Modèle de cassure : génération de nouvelles trajectoires « numériques » en cours de calcul
- Nombre de trajectoires « numériques » limité
- Disparition de gouttes par vaporisation et sortie du domaine : trajectoires « numériques » laissées vacantes

Intégration du modèle de cassure dans THÉSÉE

Modèle de cassure intégré dans THÉSÉE par l'intermédiaire du module diphasique Lagrange (accès aux caractéristiques des gouttes plus aisé

Modèle de cassure : génération de nouvelles trajectoires « numériques » en cours de calcul

Nombre de trajectoires « numériques » limité

Disparition de gouttes par vaporisation et sortie du domaine : trajectoires « numériques » laissées vacantes

> Optimisation du calcul par ré-utilisation des trajectoires « numériques » laissées vacantes

Intégration du modèle de cassure dans THÉSÉE

Début de l'étape Lagrangienne

Intégration du modèle de cassure dans THÉSÉE

Début de l'étape Lagrangienne

Ré-actualisation des propriétés des gouttes (tension superficielle, viscosité, densité...)
Le code de calcul THÉSÉE

Intégration du modèle de cassure dans THÉSÉE

Début de l'étape Lagrangienne

Ré-actualisation des propriétés des gouttes (tension superficielle, viscosité, densité...)

Activation du modèle de cassure Gestion des trajectoires

Le code de calcul THÉSÉE

Intégration du modèle de cassure dans THÉSÉE

Début de l'étape Lagrangienne

Ré-actualisation des propriétés des gouttes (tension superficielle, viscosité, densité...)

Activation du modèle de cassure Gestion des trajectoires

Suite de l'étape Lagrangienne (vaporisation, déplacement, dispersion turbulente...)

Domaine de calcul

Reprise de l'expérience de Vieille (1998)



Domaine de calcul

Reprise de l'expérience de Vieille (1998)



Conditions de simulation



Conditions de simulation

Goutte isolée d'oxygène liquide (LOX ou LO₂)

Conditions de simulation

- Goutte isolée d'oxygène liquide (LOX ou LO₂)
- Écoulement d'hélium à grande vitesse et sous haute pression
- Simulations : l'hydrogène (GH₂) remplace l'hélium

Conditions de simulation

- Goutte isolée d'oxygène liquide (LOX ou LO₂)
- Écoulement d'hélium à grande vitesse et sous haute pression
- Simulations : l'hydrogène (GH₂) remplace l'hélium
- Conditions d'injection

	Hydrogène (GH ₂)	Oxygène (LOX)
Température (K)	300	80
Densité (kg·m ⁻³)	5,33	1192,4
Viscosité ($kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$)	$7,961 \times 10^{-6}$	$2,\!15 \times 10^{-5}$
Vitesse $(m \cdot s^{-1})$	11	0,5;1,0;1,5
Pression (MPa)	6,6	
Tension de surface $(N \cdot m^{-1})$		$14,78 \times 10^{-2}$

Introduction de la goutte d'oxygène

- Diamètre initial de la goutte : $D_{ini} = 0,47 \times 10^{-3}$ m
- Injection de la goutte avec une vitesse perpendiculaire à la direction de l'écoulement
- Trois simulations en ne faisant varier que la vitesse initiale d'injection de la goutte dans le domaine de calcul, permettant d'encadrer les vitesses observées par Vieille (1998) et comprises entre 0,8 et 1,2 m·s⁻¹

$$V_{g01} = 0.5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$V_{g02} = 1.0 \,\mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}$$

- $V_{g03} = 1,5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
- Simulations réalisées sur 40 000 itérations, représentant un temps physique de l'ordre de 18,2 ms

Modèles utilisés

- Propriétés thermodynamiques variables pour les phases gazeuse et liquide
 - Loi des gaz réels pour la phase gazeuse
 - Polynômes de degré 3 en température pour les Cp
 - Viscosités, densités fonctions de P et T
 - Tension superficielle fonction de la température de surface de la goutte T_s
 - Conductivité thermique de l'hydrogène fonction de la température
- **Modèle** de turbulence k- ε
- Dispersion turbulente des particules
- Vaporisation du liquide selon la loi en D^2 classique

Résultats des calculs (visualisation du processus de cassure)



Résultats des calculs (critère de cassure C)



 \cap

Résultats des calculs (nombre de gouttes)



Résultats des calculs (température)



Résultats des calculs (diamètres)



Domaine de calcul

MASCOTTE : Montage Autonome Simplifié pour la Cryocombustion dans l'Oxygène et Toutes Techniques Expérimentales

Permet de reproduire l'un des injecteur du moteur VULCAIN du lanceur ARIANE V



Domaine de calcul

- MASCOTTE : Montage Autonome Simplifié pour la Cryocombustion dans l'Oxygène et Toutes Techniques Expérimentales
 - Permet de reproduire l'un des injecteur du moteur VULCAIN du lanceur ARIANE V
 - Injecteur coaxial isolé





 \Rightarrow Domaine 2D axisymétrique, de 5 degrés d'ouverture

Injection des gouttes d'oxygène liquide (LOX)

Injection le long d'un cœur potentiel liquide de longueur $L_C = \frac{6 D_1}{\sqrt{J}} = 7,8 \text{ cm}$ (Villermaux, 1998)



Injection des gouttes d'oxygène liquide (LOX)

Injection le long d'un cœur potentiel liquide de longueur $L_C = \frac{6 D_1}{\sqrt{J}} = 7,8 \text{ cm}$ (Villermaux, 1998)



Injection des gouttes d'oxygène liquide (LOX)

- Injection le long d'un cœur potentiel liquide de longueur L_C = ^{6 D₁}/_{√J} = 7,8 cm (Villermaux, 1998)
 Distribution initiale de Rosin-Rammler

 (D) ^N
 - $1 \nu_c (D) = \exp \left[-\left(\frac{D}{D_{RR}}\right)^N \right], \text{ avec } D_{RR} = 130 \times 10^{-6} \text{ m et}$ N = 2,25

Conditions de simulation

Conditions du 2^{nd} International Workshop on Rocket Combustion Modeling (Haidn, 2001), reproduisant un point de fonctionnement du dispositif MASCOTTE (J = 14,5; M = 2,1)

	Hydrogène (GH ₂)	Oxygène (LOX)
Pression (MPa)	1,0	1,0
Débit $(g \cdot s^{-1})$	23,7	50,0
Température (K)	287	85
Densité (kg·m ⁻³)	0,84	1 170
Capacité calorifique (J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹)	14 300	1 690
Vitesse $(m \cdot s^{-1})$	319	2,18
Viscosité (kg·m ⁻¹ ·s ⁻¹)	$8,6 imes 10^{-6}$	$1,94 \times 10^{-4}$
Tension superficielle $(N \cdot m^{-1})$		$1,44 \times 10^{-2}$

Modèles utilisés

- Propriétés thermodynamiques variables pour les phases gazeuse et liquide
 - Loi des gaz réels pour la phase gazeuse
 - Polynômes de degré 3 en température pour les Cp
 - \triangleright Viscosités, densités fonctions de P et T
 - Tension superficielle fonction de la température de surface T_S de la goutte
 - Conductivité thermique de l'hydrogène fonction de la température *T*
- **Modèle de turbulence** k- ε
- Dispersion turbulente des particules
 - Vaporisation du liquide selon une loi en D^2 classique

Calculs réalisés

- Effets du modèle de cassure sur les propriétés du brouillard et de l'écoulement
 - Simulation avec atomisation secondaire
 - Simulation sans atomisation secondaire
- Caractéristiques d'un calcul
 - > 200 000 itérations, avec $\Delta t = 8.8 \times 10^{-8}$ s
 - Temps physique : 17,6 ms
 - Sortie des caractéristiques toutes les 500 itérations
 - $> \approx 600$ heures sur supercalculateur SGI ORIGIN 2000
 - Génération d'environ 20 Go de données
- Résultats présentés : moyennes réalisées sur les 100 000 derniers pas de temps (≈ 7 000 000 gouttes)

Nombre de gouttes Global dans le domaine

	Nombre de gouttes	
Avec atomisation	37 419	
Sans atomisation	3 181	

















 \cap

Diamètre moyen arithmétique D_{10}

$$D_{10} = \frac{1}{N} \sum D_i$$

Global dans le domaine

Diamètre moyen arithmétique D_{10} (μ m)	
Avec atomisation	23,1
Sans atomisation	116,9





80




Diamètre moyen de Sauter D_{32}

$$D_{32} = \frac{\sum D_i^3}{\sum D_i^2}$$

Global dans le domaine

	Diamètre moyen de Sauter D ₃₂ (μ m)	
Avec atomisation	39,7	
Sans atomisation	85,7	





Diamètre moyen de Sauter D₃₂ Évolutions radiales







Simulations en conditions non réactives **Distributions finales** Évolutions axiales $(Y/D_1 = 1,2)$ 0,11_F 0,013 F 0,012 0.10 $Y/D_1 = 1,2$ $Y/D_1 = 1,2$ 0.011 0.09 0.010 0.08 0,009 0.07 0,008 QP/QP 0,06 QP/0,007 NP 0,006 0.005 0,04 0,004 0.03 0,003 0,02 0,002 0.01 0,001 0,00 0,000 50 Diamètre (µm) 200 Diamètre (µm) 75 25 100 100 300 Avec atomisation Sans atomisation Distribution de Rosin-Rammler : $1 - \nu_c (D) = \exp \left[- \left(\frac{D}{D_{RR}} \right)^N \right]$ $D_{RR} = 118,4 \times 10^{-6} \text{ m}, N = 1,9$ $D_{RR} = 22,1 \times 10^{-6} \text{ m}, N = 1,8$

Simulations en conditions non réactives **Distributions finales** Évolutions radiales $(X/D_1 = 8,0)$ 0,10 0,014 0.09 $X/D_1 = 8,0$ $X/D_1 = 8,0$ 0,08 0,012 0,07 0.010 0,06 QP/QP 0,05 (190,008 NP 0,04 0,006 0.03 0,004 0.02 0,002 0,01 0,000 0,00^L 50 Diamètre (µm) 75 25 200 Diamètre (µm) 100 100 300 Avec atomisation Sans atomisation Distribution de Rosin-Rammler : $1 - \nu_c (D) = \exp \left[-\left(\frac{D}{D_{RR}}\right)^N \right]$

 $D_{RR} = 21,4 \times 10^{-6} \text{ m}, N = 1,8$ $D_{RR} = 115,8 \times 10^{-6} \text{ m}, N = 1,9$

Rapport $D_{0,5}/D_{32}$, (Simmons, 1977)

Rapport permettant de caractériser la distribution en terme de taille des gouttes / fraction de volume $D_{0,5}/D_{32} = 1,2$ (Simmons, 1977)

$$\frac{\sum_{D=0}^{D_{0,5}} V(D)}{\sum_{D=0}^{D_{Max}} V(D)} = 0.5$$

Global dans le domaine

	$D_{0,5}/D_{32}$
Avec atomisation	1,01
Sans atomisation	1,10

Rapport $D_{0,5}/D_{32}$, (Simmons, 1977) Évolutions axiales



Rapport $D_{0,5}/D_{32}$, (Simmons, 1977) Évolutions radiales







 \cap

Modèle de combustion

 Réaction à une étape de la forme : Oxydant + Combustible → Produit
 se traduisant ici par :

 $\frac{1}{2}O_2 + H_2 \longrightarrow H_2O$

- Modèle Eddy Break Up (modèle de combustion à chimie infiniment rapide), particulièrement adapté à la combustion dans des conditions turbulentes (ici modèle k- ε)
- **Flamme** à haute température ($\sim 3\,000\,$ K)
 - Dissociation des produits de la réaction
 - Prise en compte par correction du Cp des produits de combustion

Calculs réalisés

- Effets du modèle de cassure sur les propriétés du brouillard et de l'écoulement
 - Simulation avec atomisation secondaire
 - Simulation sans atomisation secondaire
- Caractéristiques d'un calcul
 - > 200 000 itérations, avec $\Delta t = 7 \times 10^{-8}$ s
 - ▶ Temps physique : 14 ms
 - Sortie des caractéristiques toutes les 500 itérations
 - $> \approx 1\,000$ heures sur supercalculateur SGI ORIGIN 2000
 - Génération d'environ 30 Go de données
- Résultats présentés : moyennes réalisées sur les 100 000 derniers pas de temps (200 séries de caractéristiques)





Température de l'écoulement



.

Température de l'écoulement



.

Température de l'écoulement











La vaporisation turbulente

- Contexte de l'étude
- Objectifs de l'étude
- L'atomisation secondaire
 - Description du processus-Principaux paramé
 - ▶ Modélisation de l'atomisation secondaire
 - Validation du modèle de cassure secondaire
 - Simulations du banc d'essai MASCOTTE
- La vaporisation turbulente
 - Description du processus-Principaux paramètres
 - Modélisation de la vaporisation turbulente
 - Simulations de la vaporisation turbulente

Conclusions et perspectives



Établissement d'un transfert de chaleur du milieu gazeux vers le milieu liquide (chauffage de la goutte)
Établissement d'un transfert de masse du milieu liquide vers le milieu gazeux (évacuation de la vapeur générée)
Création de gradients de température et de matière entre les phases

La loi en D^2

- **Modèle de base de la vaporisation : la loi en** D^2
 - Goutte isolée à symétrie sphérique
 - Écoulement s'adaptant instantanément aux conditions autour de la goutte
 - Équilibre à la surface de la goutte
 - Pression constante autour de la goutte
 - > Propriétés de transport constantes (Le = 1)
 - > Température de la goutte constante et uniforme

La loi en D^2

- Modèle de base de la vaporisation : la loi en D^2
- Limitations
 - Effet de convection non pris en compte
 - > Chauffage de la goutte
 - > Effets des interactions dans un brouillard
 - Effets supercritiques

La loi en D^2

- **Modèle de base de la vaporisation : la loi en** D^2
- Limitations
- Loi en D^2

$$D^2 = D_0^2 - Kt$$

Taux de vaporisation

$$K = 8 \frac{\rho_{Fg}}{\rho_{Fl}} D_m \ln (1+B) = 8 \frac{\lambda_g}{\rho_{Fl} C p_g} \ln (1+B)$$

Temps de vaporisation de la goutte D^2

$$t_v = \frac{D_0^2}{K} = \frac{\rho_{Fl} D_0^2}{8 \frac{\lambda_g}{Cp_g} \ln\left(1+B\right)}$$

Vaporisation en milieu turbulent

- Vapeur évacuée plus rapidement ⇒ modification du gradient de vapeur autour de la goutte
- Modification du gradient de température autour de la goutte
- Déformation de la goutte \Rightarrow perte de la symétrie sphérique (une des principales hypothèses de la loi en D^2), et augmentation de l'interface liquide/gaz
- Accroissement de la vaporisation seulement dépendante de l'intensité de la turbulence et non de son échelle (Driscoll et Pelaccio, 1980)

Modélisation de la vaporisation turbulente

- Modélisation basée sur les résultats expérimentaux de Birouk (1996)
 - Goutte sphérique suspendue par une fibre en quartz
 - Variation des propriétés de la goutte (densité, température d'ébullition...) par changement de sa composition (du n-hexane au n-décane)
 - Diamètre initial de la goutte compris entre 1,5 et 1,7 mm
 - Environnement turbulent d'air à vitesse moyenne nulle, à température et pression ambiantes
 - Suivi temporel du diamètre de la goutte pour différentes intensités de la turbulence

Modélisation de la vaporisation turbulente

- Modélisation basée sur les résultats expérimentaux de Birouk (1996)
- Taux de vaporisation turbulent

 $\frac{K_{turb}}{K} - 1 = 0,019 \, Re_t^{2/3} Sc^2 \, \left(Re_t = \sqrt{q} D_0 / \nu, \, Sc = D_m / \nu \right)$

Modélisation de la vaporisation turbulente

- Modélisation basée sur les résultats expérimentaux de Birouk (1996)
- Taux de vaporisation turbulent

 $\frac{K_{turb}}{K} - 1 = 0,019 Re_t^{2/3} Sc^2 (Re_t = \sqrt{q}D_0/\nu, Sc = D_m/\nu)$ Correction du coefficient de traînée de la goutte Coefficient de traînée d'une goutte sans vaporisation $C_D = \frac{F}{(\pi/4) D^2 (\rho_a U_a^2/2)}$

Modélisation de la vaporisation turbulente

- Modélisation basée sur les résultats expérimentaux de Birouk (1996)
- Taux de vaporisation turbulent

 $\frac{K_{turb}}{K} - 1 = 0,019 Re_t^{2/3} Sc^2 (Re_t = \sqrt{q}D_0/\nu, Sc = D_m/\nu)$ Correction du coefficient de traînée de la goutte
Coefficient de traînée d'une goutte sans vaporisation $C_D = \frac{F}{(\pi/4) D^2 (\rho_a U_a^2/2)}$

Coefficient de traînée d'une goutte en vaporisation $C_D (1 + B_{turb})^{0,2} = \frac{24}{Re} + 4,8 Re^{-0,37}$ pour 10 < Re < 300

Modélisation de la vaporisation turbulente

- Modélisation basée sur les résultats expérimentaux de Birouk (1996)
- Taux de vaporisation turbulent

 $\frac{K_{turb}}{K} - 1 = 0,019 Re_t^{2/3} Sc^2 (Re_t = \sqrt{q}D_0/\nu, Sc = D_m/\nu)$ Correction du coefficient de traînée de la goutte

- Coefficient de traînée d'une goutte sans vaporisation $C_D = \frac{F}{(\pi/4) D^2 \left(\rho_g U_g^2/2\right)}$
 - Coefficient de traînée d'une goutte en vaporisation
 C_D (1 + B_{turb})^{0,2} = ²⁴/_{Re} + 4,8 Re^{-0,37} pour 10 < Re < 300
 Coefficient de transfert turbulent

$$K_{turb} = 8 \frac{\rho_{Fg}}{\rho_{Fl}} D_m \ln \left(1 + B_{turb}\right) = 8 \frac{\lambda_g}{\rho_{Fl} C p_g} \ln \left(1 + B_{turb}\right)$$

Le code de calcul MSD

Présentation du code MSD (code ONERA)

- Code RANS tridimensionnel instationnaire
- Calculs parallèles avec méthodes MPI et PVM
- Intégration temporelle implicite ou explicite
- Méthodes spatiales : Roe et dérivées, schémas mixtes...
- Calculs mono ou multi-espèces
- Lois des gaz parfaits ou réels
- Thermodynamique variable ou constante
- Turbulence : modèles à 1 ou 2 équations $(k-\varepsilon, ...)$
- Domaines de calcul 1D, 2D et 3D, avec conditions de périodicité et de symétrie
- Modèles de combustion : Eddy Break Up, Cramer,
 CLE...

Le code de calcul MSD

Présentation du code MSD (code ONERA) Phase dispersée

- Calculs multiphasiques avec une approche Eulérienne ou Lagrangienne
- Introduction ponctuelle des particules
- Particules à thermodynamique constante ou variable, inertes ou évaporantes
- Dispersion turbulente des particules
- Couplage avec la phase gazeuse « one way coupling » ou « two way coupling »

Le code de calcul MSD

Intégration du modèle dans MSD

- Modèle de vaporisation turbulente intégré dans MSD par l'intermédiaire du module diphasique Lagrangien SPARTE (accès aux caractéristiques des gouttes plus aisé)
- Remplacement des routines d'évaluation de la vaporisation et du calcul du coefficient de traînée
- Actualisation des coefficients de transferts (massique et thermique) par le coefficient de transfert turbulent B_{turb}
- Remplacement du coefficient de vaporisation classique par le coefficient de vaporisation turbulent K_{turb}

Simulations de la vaporisation turbulente

Injection des gouttes d'oxygène liquide

- Maillage identique à celui utiliséau cours des calculs d'atomisation secondaire
- 10 injecteurs le long du cœur potentiel introduisant chacun 10 % du volume liquide


Injection des gouttes d'oxygène liquide

- Maillage identique à celui utilisé pour les calculs d'atomisation secondaire
- 10 injecteurs le long du cœur potentiel introduisant chacun 10 % du volume liquide
- Vitesse initiale d'injection parallèle à l'axe, avec $V_{g0} = 10 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
- Diamètre initial des gouttes : $D_{ini} = 82 \times 10^{-6} \text{ m}$

Simulations de la vaporisation turbulente Calculs réalisés Effets du modèle de vaporisation turbulente sur les propriétés des gouttes \triangleright Simulation avec vaporisation suivant la loi en D^2 Simulation avec le modèle de vaporisation turbulente Caractéristiques d'un calcul > 200 000 itérations, avec $\Delta t = 8.8 \times 10^{-8}$ s > Temps physique : 17,6 ms $> \approx 200$ heures sur COMPAQ ALPHA DS20E Génération d'environ 3 Go de données Résultats correspondant aux propriétés d'une goutte issue de l'avant dernier injecteur suivant la direction axiale

Diamètre de la goutte



Taux de vaporisation



Localisation de la goutte



Vitesse de la goutte



Température



- Contexte de l'étude
- Objectifs de l'étude
- L'atomisation secondaire
 - Description du processus-Principaux parametri
 - Modélisation de l'atomisation secondaire
 - Validation du modèle de cassure secondaire
 - Simulations du banc d'essai MASCOTTE
- La vaporisation turbulente
 - Description du processus-Principaux paramètres
 - Modélisation de la vaporisation turbulente
 - Simulations de la vaporisation turbulente
 - Conclusions et perspectives

Conclusions

- Modèle d'atomisation secondaire
 - Élaboration d'un modèle permettant de générer des gouttes secondaires de différentes dimensions
 - Forte augmentation du nombre des gouttes par réduction de leurs diamètres
 - Distributions de Rosin-Rammler loin de l'injection
 - Favorise la vaporisation et donc la combustion
 - Confinement des gouttes par le jet gazeux dans le cas de l'utilisation de l'atomisation secondaire
 - Reproduction plus correcte du profil de température dans le cas des calculs en combustion

Conclusions

- Modèle d'atomisation secondaire
 - Reproduction de la structure de type flamme-jet de diffusion observée expérimentalement (Herding, 1997 ; Mayer et Tamura, 1996)
 - Flamme accrochée à la lèvre de l'injecteur (Juniper et al., 2001)
 - Quasi indépendance des propriétés du brouillard vis-à-vis des distributions initiales injectées (non présenté ici)

Conclusions

- Modèle d'atomisation secondaire
- Modèle de vaporisation turbulente
 - Reproduction de la plus forte vaporisation observée expérimentalement
 - Croissance plus lente de la température de la goutte en raison de la plus forte part de l'énergie consacrée à la vaporisation
 - Trajectoires des gouttes influencées par la vaporisation en raison des variations entraînées dans l'environnement proche ainsi que dans les propriétés des gouttes (variation différente de la température)

Perspectives

- Utilisation d'un modèle de combustion à chimie détaillée
- Pour les gouttes, prise en compte des processus de coalescence, de déformation...
- Caractériser les effets de la turbulence sur la dispersion des gouttes dans le domaine de calcul
- Couplage des deux modèles dans le même code pour une simulation du dispositif MASCOTTE plus précise